

2023 年度

教育と研究に関する年次報告書

神戸大学
大学院理学研究科化学専攻
理学部化学科

2024 年 7 月

目次

はじめに	3
1. 化学領域の構成と活動	4
(1) 人員構成	4
①教育研究分野単位のスタッフ	4
②教育研究分野単位の院生学生	5
(2) 人事異動	5
(3) 領域（学科）の運営分担	6
(4) 領域（学科）の行事	7
(5) 社会活動（学会活動）	8
(6) 海外渡航	10
(7) 外国人訪問者	10
(8) 科学研究費	11
(9) その他の研究助成	13
(10) 校費の使用状況，研究環境の整備	15
2. 教育活動	16
(1) カリキュラム(学部, 大学院)	16
(2) 開講科目担当(学部, 大学院, 全学共通)	16
(3) 学位授与（博士，修士，学士）	21
(4) 進路状況（博士，修士，学士）	24
(5) 他大学等への出講	25
(6) RA, TA・SA・STA の任用	25
(7) ディプロマ・ポリシー達成度アンケート	25
(8) 学生による授業評価	27
3. 研究活動	28
(1) 国内共同研究の記録	28
(2) 国際共同研究の記録	32
(3) 学術集会の開催	34
(4) 雑誌編集委員	35
(5) 研究支援体制	35
(6) 個別研究活動の記録	35
(7) 社会的な講演	35
(8) 学会賞等	36
(9) 著書数・査読論文数・講演数（国際・国内）・受賞数の記録	37

別紙 個別研究活動の記録(2023年度)
教育実績報告書(2023年度)

はじめに

この年次報告書は、神戸大学大学院理学研究科化学専攻・理学部化学科、分子フォトサイエンス研究センター、および数理・データサイエンスセンターにまたがる、理学系化学関連分野の教育と研究に関する2023年度の活動をまとめたものです。学内外の皆さまにご高覧いただき、忌憚のないご意見、ご批判を仰ぐべく毎年公開しております。

私ども化学専攻・化学科は、化学に関連した知的基盤の形成と人材育成によって社会に貢献することを目標として、教育研究に取り組んでおります。一方、人口動態をはじめとする社会情勢の目まぐるしい変化の中で、教育研究を取り巻く環境は年々変化しています。私どもの活動内容が目標にふさわしいものであるか、ご意見を賜れば幸いです。

2024年 7月 31日

2024年度 化学専攻 専攻長 大西 洋

1. 化学領域の構成と活動

(1) 人員構成

① 教育研究分野単位のスタッフ

表 1－(1)a. スタッフ配置 (*分子フォトサイエンス研究センター、+数理・データサイエンスセンター)

教育研究分野	教 授	准 教 授	講 師	助 教	研 究 員 (PD)等
分子動力学	和田昭英	*笠原俊二			
物性物理化学	大西 洋 +木村建次郎	枝 和男			森口志穂(～R5.6 理学 研究科研究協力員, R5.7～非常勤講師(研 究)) 大塚利行(理学研究科 研究員) CHEW YI HAO(学術研 究員)
反応物理化学	*小堀康博 *立川貴士			*婦木正明 (特命助手) *岡本 翔 (助手) *隈部佳孝 (特命助手)	
固体化学	持田智行 内野隆司	高橋一志			Kobra Zavar Mousavi (R5.9～学術研究員)
状態解析化学	*富永圭介	秋本誠志			
有機反応化学	林 昌彦 松原亮介				Weibin XIE (～R5.9 学術 研究員, R5.10～特命助 教)
生命分子化学		田村厚夫 茶谷絵理 木村哲就			朝田晃一 (理学研究科研究協力 員) 飯田禎弘(学術研究員)
有機分子機能		津田明彦			
共通					古家圭人(技術職員)
構造解析化学 (連携講座)	小金澤智之 上杉健太郎 (客員教授)	関澤央輝 (客員准教授)			
理論生物化学 (連携講座)	中嶋隆人 (客員教授)				

②教育研究分野単位の院生学生

表1－(1)b. 院生学生分属(*学術振興会特別研究員)

教育研究分野	D3	D2	D1	M2	M1	B4	研究生 (院・学部)
分子動力学		1		3	3	4	
物性物理化学	4	1	1	2	3	6	2
反応物理化学				4	5	4	
固体化学				5	6	6	
状態解析化学	2	2		2	4	5	1
有機反応化学	2		2	5	7	4	3
有機分子機能		1		3	2	2	2
生命分子化学	3			6	5	6	

(2) 人事異動

氏 名	異動年月日	内 容
Weibin XIE	2023. 10. 1	着任(特命助教)
松原亮介	2023. 12. 1	昇任(准教授→ 教授)

(3) 領域(学科)の運営分担

表1－(3)．領域運営役割分担の記録(専攻内委員)

役 割	氏 名
専攻長	内野隆司
副専攻長	和田昭英
教務委員	田村厚夫
副教務委員	木村建次郎
予算委員	枝 和男
広報委員	秋本誠志
就職委員	林 昌彦 (～R5.9) 立川貴士(R5.10～)
自己評価委員	大西 洋
入学試験委員	茶谷絵理
副入学試験委員	木村哲就
ネットワーク運営委員	木村哲就

表1－(3)．領域運営役割分担の記録(研究科・全学委員等)

役 割	氏 名
外部資金アドバイザーボード	木村建次郎
安全衛生会議	松原亮介
「安全の手引」編集委員会	木村建次郎
金工室主任	笠原俊二
神戸大学 120 年史部局史委員会	持田智行
技術職員職務協議委員会	内野隆司
安全衛生委員会	古家圭人
研究基盤センター運営委員会	大西 洋
化学物質安全管理委員会	松原亮介
化学物質安全管理委員会専門委員会	津田明彦

化学物質管理者・保護具着用管理責任者	松原亮介
化学物質取扱主任者	高橋一志
初年次セミナー専門委員会	高橋一志
グローバル教育センター運営委員会	和田昭英
海外学生派遣委員会	富永圭介
環境保全推進センター運営委員会	松原亮介
環境保全推進員	松原亮介
特別管理産業廃棄物管理責任者	松原亮介
中和・曝気槽管理運営ワーキンググループ(A棟)	古家圭人
環境管理センター技術指導員	古家圭人
大学教育推進機構 神戸グローバルチャレンジプログラム委員会	富永圭介
分子フォトサイエンス研究センター運営委員会	和田昭英
学術研究不正行為防止委員会	立川貴士
中和曝気槽委員 (総合研究棟 1,2 号館)	田村厚夫

(4) 領域(学科)の行事

表1－(4)．領域行事の記録

日 時	行 事
4月 5日	新入生ガイダンス(学部編入学)
4月 6日	新入生ガイダンス(大学院)
4月 7日	新入生ガイダンス(学部)
4月10日	前期授業開始
5月13日	オープンラボ
7月1日, 2日	3年次編入試験
8月 8日	オープンキャンパス
8月22日, 23日	大学院博士前期(修士)課程 入学試験
8月24日	大学院博士後期(博士)課程 入学試験
10月 2日	後期授業開始

10月28日	ホームカミングデイ
2月14日, 15日	修士論文発表会
2月20日	大学院研究経過発表会
3月 6日	4年生特別研究発表会
3月26日	学部・修士・博士学位授与式

(5) 社会活動(学会活動)

表1－(5)．社会活動(学会活動)の記録

氏名	活動内容	期間
秋本誠志	日本光合成学会幹事	11. 4. 1- 継続中
	光合成セミナー運営委員会委員	11. 7. 10- 継続中
	International conference “Photosynthesis and hydrogen energy research for sustainability”, organizer member	19.2.1-継続中
内野隆司	日本学術振興会 アモルファス・ナノ材料第 147 委員会委員	11. 4. 1- 継続中
	京都大学化学研究所 国際共同利用 共同研究拠点 委員会委員	18.11.13- 継続中
	日本セラミックス協会 代議員	17-4.1- 継続中
枝 和男	日本ポーラログラフ学会評議員	19.1.1- 継続中
大西 洋	次世代ナノプローブ技術委員会委員	23.10 - 継続中
	JST 創発的研究支援事業アドバイザー (創発 AD)	23.10 - 25.9
	北海道大学触媒科学研究所運営協議会委員	24.4 - 26.3
	北海道大学触媒科学研究所触媒構造研究部門教員選考委員会委員	23.5 - 24.3
	International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM), program committee chair	23.5 - 24.3
	触媒科学計測共同研究拠点 共同利用・共同研究拠点課題等審査専門委員会委員長	22.4 - 24.3
	応用物理学会薄膜表面分科会幹事	18.4 - 継続中
	金属酸化物表面科学国際ワークショップ international steering committee member	18.4 - 継続中
	日本表面真空学会 理事	22.5 - 継続中
	日本表面真空学会 産業連携・会員増強委員	18.4 - 継続中
笠原俊二	分子分光研究会運営委員	15.4.1 - 継続中
	日本分光学会関西支部幹事	17.8.1 - 継続中

	日本分光学会代議員	18.5.22 - 継続中
木村建次郎	AMED 評価委員	22.8.5- 継続中
木村哲就	蛋白質科学会アーカイブ編集委員	18.10.1- 継続中
小堀康博	国際スピン化学会議委員	13.4.1 - 継続中
	電子スピンスサイエンス学会総務担当理事	22.2.1 – 24.3.1
	International EPR (ESR) Society, Vice President – Asia/Oceania	20.1-1 – 23.12.31
	光化学協会理事	22.1.1 - 継続中
	分子科学会第 9 期運営委員	22.8.1- 継続中
立川貴士	Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews, Associate editor	22.8.1 - 継続中
	光化学協会常任理事	24.1.1 - 継続中
田村厚夫	大阪大学蛋白質研究所共同研究員	21.4.1 - 継続中
	日本生物物理学会分野別専門委員(タンパク質設計・ドラッグデザイン)	22.1.1 - 継続中
高橋一志	錯体化学会 討論会・国際会議運営委員	20.12.1 - 継続中
茶谷絵理	日本蛋白質科学会執行役員、代議員	20.6.25 – 継続中
	日本生化学会評議員	22.9.1 – 継続中
	日本生物物理学会理事	23.5.1 – 継続中
	日本生物物理学会分野別専門委員	24.1.1 – 継続中
富永圭介	テラヘルツテクノロジーフォーラム研究交流委員センシング(化学)部門長	10.6.18 - 継続中
	日本学術振興会テラヘルツ波科学技術と産業開拓第 182 委員会委員	08.10.1 - 継続中
	文部科学省教科用図書検定調査審議会臨時委員	23.4.1 - 継続中
林 昌彦	近畿化学協会代議員	18.4.1- 継続中
	近畿化学協会有機金属部会幹事	17.4.1- 継続中
	国際有機化学京都会議(IKCOC)組織委員	23.4.- 継続中
松原亮介	有機合成化学協会関西支部幹事	14.4.1 - 継続中
	日本化学会近畿支部幹事	23.4.1 - 継続中
	有機合成化学セミナー実行委員	23.4.1 – 24.3.31
	反応と合成の進歩シンポジウム実行委員	23.4.1 – 継続中

和田昭英	Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics Committee member	10.4.1 – 継続中
	応用化学研究会 理事	12.4.1 – 継続中

(6) 海外渡航

表1－(6)．海外渡航記録

氏 名	渡 航 期 間	渡 航 先	渡 航 目 的
秋本誠志	1.5-12	インド	17th DAE-BRNS Biennial Trombay Symposium on Radiation & Photochemistry にて研究成果発表・情報収集
大西洋	1.22-25	中国	Prof. Ying Jian, Prof. Sheng Meng ら(北京大学)を訪問して共同研究について打ち合わせ
	7.1-12	スペイン, ドイツ	IUVSTA-ZCAM workshop(スペイン)に参加して研究成果発表・Prof. Mischa Bonn ら(ドイツ)を訪問して共同研究について打ち合わせ
	5.15-17	韓国	日韓触媒シンポジウム(ソウル)に参加して研究成果発表
小堀康博	5. 28-6.2	米国	ECS Meeting にて招待講演
	6.26-30	台湾	日台シンポジウム参加と学術変革領域 A(動的エキシトン)領域会議にて成果報告
	11.25-28	ドイツ	The 8th International Symposium on Dynamic Exciton にて招待講演
	11.29-12.2	フランス	The 9th International Symposium on Dynamic Exciton にて招待講演
茶谷絵理	4.1-3	台湾	共同研究打合せおよび実験の実施
	5.7-15	台湾	共同研究打合せおよび実験の実施
	8.29-9.10	台湾	共同研究打合せおよび実験の実施
	2.24-3.2	フィリピン	CGP 理学 UPLB コースへの帯同
富永圭介	6.10-18	オランダ	TRVS2023 (Time Resolved Vibrational Spectroscopy 2023) に参加・発表を行う
	7.16-22	フィリピン	学会参加、発表 (PJTW2023/SPP2023) ・共同研究打合せ
	8.12-15	シンガポール	GCP NTU コース引率
	8.26-9.2	ベトナム	学会参加 (The 8th Academic Conference on Natural Science for Young Scientists, Master and PhD Students) ・共同研究打合せ
	10.25-30	インド	学会参加・発表 (Structure and Dynamics of Chemical and Biomolecular Systems (SDCBS23))
	11.1-3	台湾	研究打ち合わせ
	3.3-7	フィリピン	GCP UPLB コース引率、および研究打合せ

(7) 外国人訪問者

表1－(7)．外国人訪問者の記録

訪問者氏名	滞在期間	国 籍	所属機関	目 的	受入先	費用の支出
Christopher W. M. Kay	2024. 2.15-3.31	英国	Saarland University, Germany	結晶性有機薄膜の一重項分裂による室温メーザー	化学専攻 小堀研究室	JSPS 外国人研究者招へい事業(短期)

Martin Lemaire (准教授)	2023. 6.13- 7.3	カナダ	Brock University	Introduction to Chemistry の非常勤 講師	化学専攻 高橋研究室	先方負担
Nan Wang (教 授) ほか 11 名	2023. 8.1	中国	Huazhong University of Science and Technology	研究室訪問	化学専攻 立川研究室	先方負担
額爾敦(教授)	2023. 1.19- 2024. 4.17	中国	内モンゴル医 科大学薬学 院	研究能力向上と該 当研究分野での日 中研究交流に資す る	化学専攻 津田研究室	中国国家 留学基金

(8) 科学研究費

表1－(8)a. 科研費一覧(研究代表者)

※他機関研究者への配分がある場合は、「直接経費配分額」欄に配分後の金額を記載することとする。

種 目	研 究 課 題 名 (課 題 番 号)	研究代表者	直接経費 総額 (千円)	直接経費 配分額 (千円)	間接経費 配分額 (千円)
学術変革 領域研究 A(計画・補 助金)	散乱理論・散乱イメージング理論の構築 (20H05889)	木村建次郎	21,092	21,092	6,240
学術変革 領域研究 A(計画・補 助金)	電子スピン分極の空間映像化による光 誘起動的エキシトン相互作用の解析 (20H05835)	小堀康博	7,338	7,338	2,370
学術変革 領域研究 A(公募・補 助金)	ベタイン型ラジカルの動的エキシトン効 果の解明と酸化反応連結型 CO2 光還 元への応用(23H03961)	松原亮介	3,000	3,000	900
学術変革 領域研究 A(公募・補 助金)	液体で創る金属錯体系超セラミックス: 固体を「その場合成」する革新的合成 法(23H04629)	持田智行	2,100	2,100	630
挑戦的萌 芽研究 (基金)	固体に挟まれた潤滑油分子の並進運 動計測:単一蛍光分子追跡 (21K18935)	大西 洋	1,600	450	480
挑戦的萌 芽研究 (基金)	分子振動で短波長変換を実現する超 高効率光アップコンバーター分子 (22K19008)	小堀康博	2,600	2,600	780
挑戦的萌 芽研究 (基金)	有機金属錯体でプラスチック結晶を創 る:柔らかい錯体結晶相の開拓 (22K19049)	持田智行	1,400	1,200	420
基盤研究 (A)	人工光合成をめざす半導体光触媒: オペランド計測によるミリ秒反応化学の 解明(22H00344)	大西 洋	6,300	5,000	2,190
基盤研究 (B)	フラクタル構造を有する超伝導/強磁性 複合体の合成とその磁気構造の解明 (21H01622)	内野隆司	1,600	1,600	480
基盤研究 (B)	時間分解測定法による ABC トランスポ ーター膜輸送機構の化学的解明 (22H02198)	木村哲就	2,700	2,700	810

基盤研究 (B)	高効率かつ高選択的な光触媒水分解のための基礎学理構築(21H02049)	立川貴士	2,800	2,800	840
基盤研究 (B)	アミロイド核生成を誘起するタンパク質集合動態の解明(20H03224)	茶谷絵理	1,900	1,900	570
基盤研究 (B)	金属錯体で創る機能性液体:物性・反応・空間機能の開拓(20H02756)	持田智行	1,900	1,750	570
基盤研究 (C・基金)	高度な触媒能を持つ骨格拡張型閉殻ポリオキソメタレートの開発原理の研究(21K05229)	枝 和男	700	650	210
基盤研究 (C・基金)	三連続したアミノ基とヒドロキシ基をもつキラルビルディングブロックの効率的合成(21K05055)	林 昌彦	800	800	240
基盤研究 (C・基金)	フロキサン環の新規修飾法開発に基づく普遍的官能基の多様的変換(21K05054)	松原亮介	900	900	270
海外連携 (基金)	炭素資源変換を可視化する単一分子反応イメージング技術の開発	立川貴士	1,600	600	480
その他補助金	外国人招へい研究者(短期)	小堀康博	150	150	0
若手研究 (基金)	三重項－三重項消滅により生じた多重励起子におけるスピン変換機構の解明(22K14648)	岡本 翔	1,400	1,400	420
特別奨励 (基金)	多様なアミロイド構造形成を誘起するクロスシーディングの伝播機構の解明(22KJ2255)	柚 佳祐	800	800	0

表1－(8)b. 科研費一覧(研究分担者)

種 目	研 究 課 題 名 (課 題 番 号)	研究代表者 (所属機関)	研究分担者	直接経費 配分額 (千円)	間接経費 配分額 (千円)
挑戦開拓	液液相分離中アミロイド生成の定量的解析法の確立(22K18316)	福山真央 (東北大学)	茶谷絵理	500	150
基盤研究 (S)	境界潤滑の科学－添加剤吸着層の構造・物性に基づく低摩擦現象の本質的理解(23H05448)	平山朋子 (京都大学)	大西 洋	1,980	594
基盤研究 (A)	人工光合成をめざす半導体光触媒:オペランド計測によるミリ秒反応化学の解明(22H00344)	大西 洋 (神戸大学)	小堀康博	1,000	0
基盤研究 (A)	電圧損失抑制を目指した有機薄膜太陽電池の創製(23H00309)	今堀 博 (京都大学)	小堀康博	2,000	600
基盤研究 (B)	人工培養系に適した実用藻類ツノケイソウの光合成システムの創出(23H02347)	伊福健太郎 (京都大学)	秋本誠志	1,300	390
基盤研究 (B)	常緑針葉樹の光合成調節機構の複合体プロテオミクスおよび分光学的手法による統合的解析	田中亮一 (北海道大学)	秋本誠志	800	240
基盤研究 (B)	病原菌ヘムトランスポーターの構造変化の追跡と基質輸送機構の解明(21H02421)	杉本 宏 (理化学研究所)	木村哲就	200	60
学術変革 領域研究 A(総括)	動的エキシトンの学理構築と機能開拓(21H05831)	今堀 博 (京都大学)	小堀康博	230	69

新学術領域研究 (補助金)	時間分解構造解析を補完する精密顕微分光計測(19H05784)	久保 稔 (兵庫県立大学)	木村哲就	4,886	1,465
国際 B	一重項分裂を駆動力とする革新的光反応の開発(20KK0120)	羽會部 卓 (慶應義塾大学)	小堀康博 婦木正明	400 400	120 120
海外連携 (基金)	炭素資源変換を可視化する単一分子反応イメージング技術の開発	立川貴士 (神戸大学)	松原亮介 木村哲就	500 500	0 0

(9)その他の研究助成

表1ー(9). 研究助成(科研費以外・研究代表者)

プロジェクト制度名 又は 共同研究相手先	研 究 課 題 名	研究代表者 (所属機関)	直接経費 総額 (千円)	直接経費 配分額 (千円)	間接経費 配分額 (千円)
くさの会理学部実習支援費(化学)	化学専攻「構造解析学」および「構造解析学特論」の講義における Spring-8 への見学に要する経費の一部援助	化学専攻	50	50	0
一般財団法人 ノーリツ ぬくもり財団	自己相似的階層構造を活用した高効率熱電変換材料の創成	内野隆司	1,500	1,500	0
一般社団法人先端膜工学 研究推進機構	先端膜工学に関する研究	大西 洋	245	245	5
甲南化工株式会社	材料開発奨学寄附金	枝 和男	196	196	4
株式会社 Integral Geometry Science	乳がんを有する成人女性及び健康成人女性を対象とした乳房用マイクロ波画像診断装置 IGS-0001 の有効性及び安全性を検討する単施設評価者盲検試験	木村建次郎	15,700	15,700	4,710
旭化成株式会社	電解槽電極の電流分布計測技術の開発	木村建次郎	1,538	1,538	462
株式会社 Integral Geometry Science	応用数学と計測に関する基礎研究	木村建次郎	11,074	11,074	226
国立研究開発法人科学 技術振興機構	【CREST】電子スピン共鳴法によるスピン超偏極機構の解明	小堀康博	4,500	4,500	1,350
	研究・教育活動に対する研究助成	高橋一志	980	980	20
国立研究開発法人新エ ネルギー・産業技術総 合開発機構	【NEDO】誘電体セラミックスメソ結晶の開発と次世代電子デバイスへの応用	立川貴士	7,692	7,692	2,307
太陽誘電株式会社	【NEDO・太陽誘電】誘電体セラミックスメソ結晶の開発と次世代電子デバイスへの応用(光触媒に関する応用は除く)	立川貴士	7,692	7,692	2,307

国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構	パッシブ型水素生成材料の開発(その2)	立川貴士	9,000	9,000	0
パナソニックホールディングス株式会社	パッシブ型水素生成材料の酸化還元反応効率向上の研究	立川貴士	5,923	5,923	1,776
株式会社シード・プランニング	学術相談(理学研究科)	田村厚夫	23	23	6
ナノバイオ研究奨学寄附金	機能性ペプチド設計に対する研究助成	田村厚夫	1,715	1,715	35
株式会社村田製作所	新デザインペプチドを用いたデバイス研究3	田村厚夫	5,400	3,800	1,620
Integral Geometry Science 社寄附金	研究助成	茶谷絵理	1,960	1,960	40
公益財団法人ひょうご科学技術協会	細胞内液滴からのアミロイド核発生機構の解明	茶谷絵理	1,000	1,000	0
浜松ホトニクス株式会社	蛍光寿命測定によるアミロイド構造の識別	茶谷絵理	769	769	231
第一工業製薬株式会社	光オンデマンド合成に関する技術指導	津田明彦	660	660	198
日本製紙株式会社	光オン・デマンド合成法を用いたセルロース系新規素材の開発に関する研究	津田明彦	2,200	2,200	660
(公財)ポリウレタン国際技術振興財団令和4年度第8回研究助成金	フロー光オン・デマンドホスゲン化反応によるポリウレタンナノファイバーの創製に対する研究助成	津田明彦	1,000	1,000	0
独立行政法人日本学術振興会	テラヘルツ分子科学アジア研究拠点	富永圭介	6,600	6,600	0
独立行政法人日本学術振興会	R5 二国間_超高速レーザー分光による深共晶溶媒の動的挙動と微視的構造に関する研究	富永圭介	30	30	0
一般財団法人丸文財団	丸文財団交流研究助成金	富永圭介	1,000	1,000	0
第49回岩谷科学技術研究助成金	「非金属触媒系による水の光酸化反応の開発」に対する研究助成	松原亮介	2,000	2,000	0
公益財団法人東電記念財団	「貴金属元素を使用しない水の光酸化触媒の開発」に対する研究助成	松原亮介	1,000	1,000	0
トヨタ自動車株式会社	二酸化炭素の有用化合物・素材への精密分子変換を光反応で可能にする高機能性触媒の開発	松原亮介	3,769	3,769	1,130
株式会社ナティアス	【Go-Tech】核酸連続生産装置の開発	松原亮介	2,500	2,500	750
株式会社ナティアス	有機科学研究に対する研究助成	松原亮介	3,136	3,136	64
一般財団法人 ノーリツぬくもり財団	二酸化炭素の還元的炭素固定を伴う有機酸化反応の連続フローシステムの構築	松原亮介	1,500	1,500	0

一般社団法人先端膜工 学研究推進機構	先端膜工学に関する研究	持田智行	245	245	5
青少年の為の科学の祭 典に関する寄附金	青少年の為の科学の祭典 に関する必要経費の補助 のため	古家圭人	20	20	0

(10)校費の使用状況, 研究環境の整備

表1－(10)．新規設備(300万円以上)

設備	購入日	金額(千円)
卓上走査電子顕微鏡	2023.7.5	6,000
Quantum light InstrumentsQ2 レーザー	2024.3.10	4,980

2. 教育活動

(1)カリキュラム(学部, 大学院)

2022 年度入学生から、化学科のカリキュラムが大幅に改定された。この改定に伴い、いくつかの講義の科目名、必修/選択必修の区分、単位数などが変更され、いくつかの講義が特別講義に変更された。これらは現在のカリキュラムの骨子を保ちつつ、今後の教員の退職や異動に柔軟に対応できるよう改定されたものである。2023 年度においては、年次進行で新旧カリキュラムが共存している状態だが、具体的には2年生が受講した科目の一部においてのみ、新カリキュラムへの移行に伴う変更があった。そのため現在のところ大きな問題は起きていないが、2024 年度にはより大きな変更を迎えるため、全体が新カリキュラムに円滑に移行できるよう見守る必要があるだろう。なお卒業研究の履修に必要な単位数の見直しについても、ワーキンググループで議論が進められてきた。

(2)開講科目担当(学部, 大学院, 全学共通)

表2－(2)a. 開講科目(理学部)

開講科目	単位数	主担当教官	開講区分	履修者数	合格者数
初年次セミナー(化学科)	1	各教員	1 年 1Q	31	31
物理化学基礎	1	大西 洋	1 年 1Q	37	35
無機化学基礎1	1	高橋一志	1 年 1Q	33	31
無機化学基礎2	1	持田智行	1 年 2Q	33	31
有機化学基礎1	1	松原亮介	1 年 1Q	32	30
有機化学基礎2	1	松原亮介	1 年 2Q	34	31
無機化学 I-1	1	持田智行	1 年 3Q	37	37
無機化学 I-2	1	持田智行	1 年 4Q	35	31
有機化学 I-1	1	松原亮介	1 年 3Q	36	24
有機化学 I-2	1	松原亮介	1 年 4Q	36	28
化学熱力学 I-1	1	枝 和男	1 年 3Q	34	33
化学熱力学 I-2	1	枝 和男	1 年 4Q	35	32
生物学科化学概論	2	枝 和男	1 年 4Q	6	6
物理学科化学概論	2	立川貴士	1 年 4Q	13	11
惑星学科化学概論	2	富永圭介	1 年 4Q	8	6
無機化学 II-1	1	秋本誠志	2 年 1Q	35	28
無機化学 II-2	1	秋本誠志	2 年 2Q	33	26
化学熱力学 II-1	1	小堀康博	2 年 1Q	31	30
化学熱力学 II-2	1	小堀康博	2 年 2Q	31	26
有機化学 II-1	1	津田明彦	2 年 1Q	31	26
有機化学 II-2	1	津田明彦	2 年 2Q	31	26
量子化学 I-1	1	和田昭英	2 年 1Q	46	37

量子化学 I-2	1	和田昭英	2 年 2Q	46	38
Introduction to Chemistry	1	高橋一志	2 年 2Q	29	27
無機化学 III-1	1	高橋一志	2 年 3Q	45	32
無機化学 III-2	1	高橋一志	2 年 4Q	39	21
分析化学 I-1	1	木村哲就	2 年 3Q	37	28
分析化学 I-2	1	木村哲就	2 年 4Q	37	30
有機化学 III-1	1	津田明彦	2 年 3Q	38	30
有機化学 III-2	1	津田明彦	2 年 4Q	39	31
生物化学 I-1	1	茶谷絵理	2 年 3Q	38	31
生物化学 I-2	1	木村哲就	2 年 4Q	41	32
量子化学 II-1	1	和田昭英	2 年 3Q	44	37
量子化学 II-2	1	和田昭英	2 年 4Q	42	31
量子化学Ⅲ	2	笠原俊二	2 年後期	31	29
化学熱力学Ⅲ	2	立川貴士	2 年後期	30	27
固体化学 1	1	内野隆司	3 年 1Q	2	0
固体化学 2	1	内野隆司	3 年 2Q	2	0
有機構造化学 1	1	津田明彦	3 年 1Q	24	19
有機構造化学 2	1	津田明彦	3 年 2Q	22	20
化学反応論 1	1	小堀康博	3 年 1Q	40	35
化学反応論 2	1	立川貴士	3 年 2Q	33	29
分析化学 II-1	1	高橋一志	3 年 3Q	22	18
分析化学 II-2	1	高橋一志	3 年 4Q	22	18
化学熱力学 III-1	1	小堀康博	3 年 1Q	37	34
化学熱力学 III-2	1	大西 洋	3 年 2Q	37	32
量子化学 III-1	1	笠原俊二	3 年 1Q	38	25
量子化学 III-2	1	笠原俊二	3 年 2Q	36	26
有機化学演習	1	松原亮介	3 年前期	37	32
化学実験 I	8	内野隆司	3 年前期	36	36
生物化学 II	2	田村厚夫	3 年前期	33	27
固体化学	2	内野隆司	3 年前期	36	32
高度教養セミナー理学部化学入門	1	田村厚夫	3 年 3Q	40	34
分子分光學 1	1	笠原俊二	3 年 4Q	26	16

分子分光化学 2	1	和田昭英	3 年 4Q	28	24
表面化学1	1	大西 洋	3 年 3Q	35	31
表面化学2	1	木村建次郎	3 年 4Q	32	25
有機合成化学 1	1	林 昌彦	3 年 3Q	1	1
有機合成化学 2	1	林 昌彦	3 年 4Q	1	1
無機機能化学 1	1	高橋一志	3 年 3Q	26	26
無機機能化学 2	1	秋本誠志	3 年 4Q	25	24
生物化学 III	2	木村哲就	3 年 4Q	14	12
溶液化学 1	1	富永圭介	3 年 3Q	17	8
溶液化学 2	1	富永圭介	3 年 4Q	9	4
化学実験 II	6	笠原俊二	3 年後期	35	32
有機合成化学	2	林 昌彦	3 年後期	15	14
量子化学演習	1	笠原俊二	3 年後期	11	6
化学熱力学演習	1	立川貴士	3 年後期	7	4
計算機化学実験	1	木村建次郎	3 年後期	36	33
生物化学 II-1	1	田村厚夫	4 年 1Q	1	0
生物化学 II-2	1	田村厚夫	4 年 2Q	1	0
特別講義 Frontiers of Chemistry	1	富永圭介	4 年前期	3	1
高度教養セミナー理学部化学	2	田村厚夫	4 年前期	34	33
特別研究	14	各教員	4 年通年	33	32

表2－(2)b. 開講科目(大学院理学研究科 博士前期課程)

開講科目	単位数	主担当教員	開講区分	履修者数	合格者数
無機化学 I	2	高橋一志	前期	28	21
無機化学 II	2	富永圭介	後期	2	1
有機化学 I	2	林 昌彦	前期	13	13
有機化学 II	2	木村哲就	後期	5	4
物理化学 I	2	笠原俊二	前期	32	30
物理化学 II	2	大西 洋	後期	6	5
理論生物化学	2	中嶋隆人	前期	27	26
構造解析学	2	上杉健太郎	前期	32	32
特別講義 有機化学特論 B	1	津田明彦	前期	9	9
特別講義 生物化学特論 B	1	茶谷絵理	前期	13	13

先端融合科学特論 A(化学)	1	和田昭英	前期	32	31
研究指導	0	各教員	前期	2	2
生物化学特論	2	田村厚夫	前期	6	4
反応化学特論	2	笠原俊二	前期	20	19
溶液化学・生物無機化学特論	2	富永圭介	前期	3	2
特別講義 Frontiers of Chemistry	1	富永圭介	前期	3	3
無機・分析化学特論 2	1	内野隆司	後期	1	1
科学英語 1	1	神前陽子	後期	10	9
科学英語 2	1	神前陽子	後期	9	8
特別講義 無機化学特論 B	1	持田智行	後期	11	10
特別講義 量子化学特論 B	1	富永圭介	後期	2	2
研究指導	0	各教員	後期	25	25
論文講究 I	4	各教員	通年	28	27
論文講究 II	4	各教員	通年	27	27
特定研究 I	4	各教員	通年	28	26
特定研究 II	4	各教員	通年	27	27

表2－(2)c. 開講科目(大学院理学研究科 博士後期課程)

開講科目	単位数	主担当教官	開講区分	履修者数	合格者数
有機化学特論 I	2	松原亮介	前期	2	2
有機化学特論 II	2	田村厚夫	後期	1	1
構造解析学特論	2	上杉健太朗	前期	1	1
特別講義 有機化学特論 C	1	津田明彦	前期	5	5
特別講義 生物化学特論 C	1	茶谷絵理	前期	4	2
特別講義 量子化学特論 C	1	富永圭介	後期	1	1

表2－(2)d. 開講科目(全学共通授業科目)

開講科目	単位数	主担当教官	開講区分	履修者数	合格者数
基礎有機化学1	1	松原亮介	1 年 1Q	59	57
基礎有機化学2	1	松原亮介	1 年 2Q	59	57
基礎無機化学1(水・3 限)	1	内野隆司	1 年 1Q	126	118
基礎無機化学2(水・3 限)	1	内野隆司	1 年 2Q	118	109
化学実験1	1	高橋一志	2 年 3Q	55	53

化学実験2	1	高橋一志	2 年 4Q	58	51
基礎物理化学1	1	大西 洋	1 年 3Q	48	27
基礎物理化学 2	1	木村建次郎	1 年 4Q	28	15
化学C	1	和田昭英	1 年 3Q	30	25
化学D	1	富永圭介	1 年 4Q	25	18
グローバルチャレンジ実習	2	富永圭介	前期	1	1
グローバルチャレンジ実習	2	茶谷絵理	後期	5	5

(3) 学位授与(博士, 修士, 学士)

学科・専攻全体としては卒業研究発表会、修士論文発表会が年次研究報告会を兼ねており、学科・専攻全体での議論が交わされている。また2006年度における理学研究科への改組を契機として、博士前期課程の学生に対しても後期課程の学生と同様に研究経過発表会での研究発表を義務づけている。

表2-(3)a. 修士論文 (令和5年9月修了 2名)

氏 名	主 査	論 文 題 目
井岡 光	富永圭介	広帯域分光法による水溶液中における温度応答性高分子の微視的状态に関する研究
高木亮輔	和田昭英	ラマン分光法による p-アミノアゾベンゼンの光定常状態における光励起効果の定量化

表2-(3)b. 博士論文 (令和6年3月修了 4名)

氏 名	主 査	論 文 題 目
黒川 南	田村厚夫	人工設計 α ヘリックス型ペプチドナノファイバーの構造および熱力学解析
藤井悠生	富永圭介	二次元赤外分光法及び分子動力学計算による水溶液中における水素結合ダイナミクス
村上 賢	林 昌彦	アルキンのジホウ素化反応の開発と置換ボラインデンの合成
柚 佳祐	茶谷絵理	Elucidation of the multistep process of amyloid fibril formation (アミロイド線維の多段階的形成プロセスの機構解明)

表2-(3)c. 修士論文(令和6年3月修了 25名)

氏 名	主 査	論 文 題 目
匡 会龍	松原亮介	Study on the photoelectric properties and applications of N-naphthylcarbazole derivatives
石野圭一郎	高橋一志	新規機能性架橋配位子及びその配位高分子の構造と物性
大村亮太	津田明彦	メタンおよびジクロロメタンを原料とするフロー光オン・デマンド有機合成
奥仲健司	松原亮介	ホウ素錯体を用いた光還元反応の開発と触媒化の検討
檜木克至	津田明彦	含フッ素ブロック化イソシアネートを原料とする新規フッ素化ポリウレタンの合成
岸川優菜	田村厚夫	白金族レアメタルとの結合能をもつ環状ペプチドの設計
北野さくら	茶谷絵理	α シヌクレインの初期凝集プロセスおよびアミロイド線維形成への関与性
楠本遼太	小堀康博	電子スピンをプローブとする分子内一重項励起子分裂機構の解明

黒木 麗	木村哲就	イクオリン Ca^{2+} 間相互作用の熱力学的・速度論的解析
桑原那弥	津田明彦	クロロホルムの光酸化生成物を用いるアミノ酸-N-カルボン酸無水物とポリカーボネートの合成
島田壮人	持田智行	サンドイッチ型 Ru 錯体をカチオンとする光反応性イオン液体の開発
菅谷美紗希	田村厚夫	新型コロナウイルスの感染を阻害する α ヘリックス型ペプチドの設計
竹内愛斗	立川貴士	動的平衡状態における有機無機ペロブスカイトの単一粒子発光観測
谷口 凜	笠原俊二	アセトアルデヒドの $S_1 \leftarrow S_0$ 遷移における高分解能レーザー分光
中明 育	内野隆司	超伝導/常伝導フラクタルナノ複合体の合成, 構造及び超伝導特性
中尾星哉	茶谷絵理	トランスサイレチン 49-127 断片のアミロイド線維形成とその変異効果の研究
西村拓真	立川貴士	実験データの機械学習によるヘマタイト光電極の性能予測
野口拓海	高橋一志	アゾビスフェノレート配位子を有する金属錯体の構造と物性評価
原 明穂	木村哲就	分光学的手法を用いた ABC トランスポーター BhuUV-T におけるヘム輸送機構の解析
原田竜大	松原亮介	可視光を用いた光増感剤フリーのベンゾイミダゾリン型有機ヒドリドの再生および光触媒としての応用
古谷実佑	秋本誠志	光合成系にみられるマイクロ秒領域におよぶ蛍光の時間分解分光測定と解析
松井恭平	大西 洋	SrTiO_3 光触媒の単結晶モデル構築と AFM 観察
三嶋里奈	内野隆司	層間酸塩基反応による六方晶窒化ホウ素剥離膜の作製とその構造及び物性解析
村山加純	小堀康博	電子スピン共鳴法による非フラーレン型有機薄膜太陽電池の界面電荷分離状態の解析
山本晟雅	和田昭英	マスター方程式に基づいた 4 種の異性体が関与する光定常状態シフトの解析

表2－(3)d. 特別研究発表(令和 6 年 3 月 30 名)

氏 名	指導教員	論 文 題 目
平尾 颯	内野隆司	高結晶性 h-BN ナノシートの合成
滝耕太郎	内野隆司	異なる焼結条件で作製した Mg/MgO/MgB_2 ナノ複合体の超伝導特性
村上陽平	高橋一志	シッフ塩基配位子を用いた中性混合原子価錯体
木村真佑里	高橋一志	新規キノンアジン型 π 電子受容体の合成の試み
澤本莉奈	木村建次郎	マイクロ波生体イメージングのための標準試料開発
白岩駿一	秋本誠志	高い波長分解能を持つ時間分解蛍光測定の実現

与力風央	富永圭介	小さな液体分子のサブテラヘルツ帯の複素誘電スペクトルの解析
阿部蓮樹	富永圭介	p-アニシルのテラヘルツスペクトルの温度変化の解析
富弥大暉	小堀康博	スピンラベル EPR 法による生体膜分子ダイナミクスの解析
田中雅大	小堀康博	電子スピン共鳴法を用いたテトラセンオリゴマーの一重項励起子分裂機構の解析
虎尾さくら	笠原俊二	NO ₂ ラジカル A-X 遷移 16218 cm ⁻¹ バンドの高分解能スペクトルの解析
山本聖生	笠原俊二	NO ₂ A-X 遷移の 16321 cm ⁻¹ における高分解能蛍光励起スペクトルの解析
文元 萌	枝 和男	Anderson 型[XM ₆ O ₂₄ H ₆] ⁽⁶⁻²⁾ の構造と安定性に及ぼすアデンダとヘテロ原子の影響
渡邊夏帆	枝 和男	Keggin 型イソポリオキソモリブデートイオン[HnMo ₁₂ O ₄₀] ⁽⁶⁻ⁿ⁾ の構造安定性に関する研究
鍋谷拓磨	和田昭英	多段階緩和過程の温度依存性
稲田夏姫	和田昭英	p-アミノアゾベンゼン量子収率の測定 ―温度・溶媒依存性―
上橋佳宏	松原亮介	カルバゾール求電子置換反応における反応性と選択性に対する置換基効果
助川綾菜	松原亮介	デフェラシロクス類縁体のホウ素錯体の合成と反応性の検討
江利口泉	津田明彦	光オン・デマンド合成法によるセルロースファイバーの機能修飾
前田直耶	津田明彦	フロー光オン・デマンド合成法を用いる N-保護アミノ酸の連続合成
出口弘汰	田村厚夫	レアアース結合能を有するペプチドの設計
中川勝太	田村厚夫	繊維形成能及び金属結合能を有する β -ヘアピン型ペプチドの <i>de novo</i> 設計
遠藤加奈子	大西 洋	酸化チタン単結晶を用いたマイクロ電極による光触媒反応の計測・評価
西城尚輝	大西 洋	タンタル酸ナトリウム光触媒による溶存酸素消費反応のマイクロ電極計測
毛利明日香	立川貴士	PET 分解酵素反応の単一粒子蛍光観測
岩田あき	立川貴士	BaZrO ₃ への S ドーピングと特性評価
吉村 悠	木村哲就	BRIL 融合シクロム b ₅₆₁ D2 発現系の構築と分光学的評
中川開斗	木村哲就	ABC トランスポーターBhuUV-T のヘム輸送における初期段階の紫外・可視吸収分光解析
藤塚健次	茶谷絵理	α B-クリスタリンによる α シヌクレイン液滴の老化の阻害
小篠 遥	持田智行	配位性アニオンを用いた光反応性 Ru 含有イオン液体の開発

(4)進路状況(博士, 修士, 学士)

大学院修了生進路状況

博士課程後期課程(3月修了4名)

日立製作所	1
神戸大学	1
東京理科大学	1
台湾国立陽明交通大学	1

博士課程前期課程(9月修了2名・3月修了25名)

AGC セラミックス	1
JASM	1
TOPPAN	1
アース製薬	1
アクセンチュア	1
ウエスタンデジタル	1
シンプレクス・ホールディングス	1
ダイキン工業	1
ナード研究所	1
パナソニックエナジー	1
ライオン	1
レーザーテック	1
ローム	1
丸善石油化学	1
三洋化成工業	1
山陽特殊製鋼	1
指月電機製作所	1
新興出版社啓林館	1
大阪有機化学工業	1
大日本科研	1
東レ	1
日本 IBM	1
神戸大学大学院理学研究科	4
その他	1

学部卒業生進路状況(3月卒業32名)

エルディーサポート	1
ニトリ	1
マクニカ	1
帝人	1
栃木県警察本部科学捜査研究所	1
野村総合研究所	1
神戸大学大学院理学研究科	24
奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	1
その他	1

(5) 他大学等への出講

表2-(5). 出講の記録

氏 名	身 分	出 講 先
隈部佳孝	招待講演者	高知工科大学
小堀康博	非常勤講師	大阪公立大学
津田明彦	客員准教授	滋賀医科大学
	講演者	京都大学工学研究科
林 昌彦	非常勤講師	九州大学大学院理学研究院
松原亮介	講演講師	東京大学
和田昭英	非常勤講師	順正学園

(6) RA, TA・SA・STA の任用

2023年度は 10名の RA を任用した。RA は全員が博士後期過程学生である。

2016年度より、TA(ティーチングアシスタント)に加え、SA(スチューデント・アシスタント)と STA(シニア・ティーチング・アシスタント)の任用が可能になった。SA とは、神戸大学学部にて在学する優秀な学生に対し、教育的配慮の下に教育に係る補助業務を行わせ、学生に対する教育的効果を高めるための学修サポートを図るとともに、これに対する手当支給により、学生への経済的支援を目的として始まった制度である。STA とは、博士課程後期課程にて在学する特に優秀な学生に対し、教育的配慮の下に専門性の高い教育補助業務を行わせ、大学教育におけるきめ細かな指導の実現や大学院学生が将来教員・研究者になるためのトレーニングの機会の提供を図るとともに、これに対する手当支給により、学生への経済的支援を目的として始まった制度である。なお STA となるためには、高い専門性を有すること、本学での TA の経験を有すること、STA のための研修を受講することなどの要件を満たす必要がある。

化学専攻では、2023年度には、48名の TA、17名の SA を任用した。TA は44名が博士前期過程の学生で、4名が博士後期過程の学生である。SA は全員が学部4年生である。

(7) ディプロマ・ポリシー達成度アンケート

学部卒業生および大学院博士課程前期課程修了生、後期課程修了生に対して行ったディプロマ・ポリシー(DP)達成度アンケートの内容と結果を報告する。

2024 年 3 月 卒業・修了対象者

【全課程共通】

問 1.あなたは、理学部化学科／理学研究科化学専攻のディプロマ・ポリシー(DP)を知っていますか。

	学部	前期課程	後期課程
よく知っていた	3	4	1
ある程度知っていた	7	10	2
どちらともいえない	8	5	0
あまり知らなかった	6	3	0
全く知らなかった	9	5	1

【課程別】

・学部

理学部化学科の DP に基づいてお尋ねします。

あなたは、次の能力等がどのくらい身についたと思いますか。

問 2.化学の基礎を理解し応用する能力

問 3.物質の構造および機能を理解する能力

問 4.現代化学を理解する能力

問 5.化学の実験手法を応用する能力

問 6.自ら課題を設定し、課題を創造的に解決する能力

	2	3	4	5	6
大いに身についた	7	9	7	10	5
どちらかといえば身についた	16	17	15	16	18
どちらともいえない	7	3	5	5	5
どちらかといえば身についていない	2	3	5	1	4
全く身につかなかった	1	1	1	1	1

・博士課程前期課程

理学研究科化学専攻の DP に基づいてお尋ねします。

あなたは、次の能力等がどのくらい身についたと思いますか。

問 2.研究成果発信のための英語能力

問 3.学際的視野に基づいた創造的な研究能力

問 4.物質の構造及び機能を根本原理から理解する能力

問 5.化学の各研究分野に関連した基礎能力、及びそれを研究に応用する能力

問 6.現代化学の広範な研究分野を俯瞰する能力

問 7.化学を深く探究するための基礎となる能力

	2	3	4	5	6	7
大いに身についた	4	8	9	8	6	11
どちらかといえば身についた	9	12	16	16	14	13
どちらともいえない	8	5	1	0	6	2
どちらかといえば身についていない	5	2	1	3	1	1
全く身につかなかった	1	0	0	0	0	0

化学専攻では、DP で定める知識や能力などを身につけさせるため、カリキュラムを編成しています。

次の科目が、あなたの知識の習得に関してどの程度役に立ったと思いますか。

問 8.科学英語科目 (研究成果発信のための英語能力の向上)

問 9.特別講義科目 (現代化学の広範な研究分野を俯瞰する能力の向上)

問 10.論文講究及び特定研究科目 (化学を深く探究するための基礎能力の向上)

問 11.コア授業科目という 教育システム (専攻内の分野の枠を超えた専門的知識の習得)

問 12.先端融合科学特論 B (理学) などの 専攻共通科目 (幅広い自然科学の知識の習得)

	8	9	10	11	12
大いに役に立った	5	7	11	8	8
役に立った	7	10	14	7	7
ある程度役に立った	7	7	1	6	8
役に立たなかった	1	0	0	0	0
わからない	1	2	0	4	2
未履修	6	1	1	2	2

・博士課程後期課程

理学研究科化学専攻の DP に基づいてお尋ねします。

あなたは、次の能力等がどのくらい身についたと思いますか。

- 問 2.研究成果発信のための英語能力
 問 3.学際的視野に基づいた創造的な研究能力
 問 4.物質の構造及び機能を根本原理から理解する能力
 問 5.化学の各研究分野に関連した高度な能力、及びそれを研究に応用する能力
 問 6.現代化学の広範な研究分野を俯瞰し、新たな研究課題の着想に活かす能力
 問 7.化学の研究を自立して行うための能力

	2	3	4	5	6	7
大いに身についた	3	3	3	2	1	3
どちらかといえば身についた	0	0	0	1	2	1
どちらともいえない	1	1	1	1	1	0
どちらかといえば身についていない	0	0	0	0	0	0
全く身につかなかった	0	0	0	0	0	0

【全課程共通】

理学研究科の学生には、公用掲示板を常に注意して掲示の事項を確認することが求められています。現在、公用掲示板は、B 棟 2 階と Z 棟 1 階に設置してあり大学での確認が必須となっていますが、将来的にこの公用掲示板をうりぼーネット掲示板などに変更して、ネットワーク経由で読めるように電子化する検討をしています。この掲示板の電子化についてどのように思いますか。

	学部	前期課程	後期課程
公用掲示板の電子化は進めた方がよい	25	22	4
現在の B 棟 2 階と Z 棟 1 階の公用掲示板で十分	1	0	0
どちらでもよい。特に意見無し	7	3	0

(8) 学生による授業評価

(学部)総合評価(5 段階)の平均は 4.6 であり、ほとんどの科目で 4 以上の高い評価を得ていた。自己学習時間については、60 分以上と回答したものが過半数(51%)である一方、30 分未満との回答が全体の 14%あり、この層の意識を高める工夫が必要だろう。ただし、30 分未満の割合は、2022 年度(21%)に比べると大きく減少しており、2021 年度(13%)および 2020 年度(11%)とほぼ平年と並ぶ結果となった。「授業内容の理解」および「専門分野への興味増」に対する肯定的回答(5 段階における上位 2 段階)はそれぞれ 77%および 85%であり、前年度(それぞれ 76%および 84%)と同程度だった。アンケートの記述式回答には、肯定的なコメントも多く見られたが、授業改善のために参考となる意見や要望も複数あった。全体として特に問題は見られないが、引き続き、学生のニーズを取り入れながら講義の工夫をしていくことが望ましい。

(大学院)総合評価(5 段階)の平均は 4.4 であり、ほとんどの科目で 4 以上の高い評価を得ていた。自己学習時間が 0~30 分未満という回答は 9%であり、前年度(10%)とほぼ変わらない結果であった。「授業内容の理解」および「専門分野への興味増」に対する肯定的評価はそれぞれ 67%および 82%であり、前年度(それぞれ 76%および 54%)に比べて後者は有意に増加した。アンケート回答数は 90 と 2022 年度の 78 から増加したが、受講生全体の意見を集計できるよう、引き続きアンケート回答率増加のための取り組みが必要である。

3. 研究活動

(1) 国内共同研究の記録

表3－(1). 国内共同研究の記録

教育研究分野	相 手 機 関	研 究 内 容	研究資金の出所
分子動力学	京都大学	硝酸ラジカルおよび二酸化窒素の高分解能分光	
	福岡大学・京都大学	光コムを用いた多環芳香族炭化水素の高分解能レーザー分光	
物性物理化学	名城大学	潤滑油界面における液体構造の統計力学解析	科研費
	東京大学	人工合成光触媒の高圧光学分光	科研費
	島津製作所・分子科学研究所	潤滑油界面の AFM による力学計測	科研費・分子科学研究所共同利用経費
	分子科学研究所・北京大学	液体-氷界面のナノ力学計測	科研費・分子科学研究所共同利用経費
	名古屋大学・北海道大学	光触媒反応生成物の時間分解検出	科研費・触媒科学計測共同研究拠点共同研究費
	学内(反応物理化学)	人工合成光触媒の EPR 解析	科研費
	千葉大学・分子科学研究所・大阪公立大学・北海道大学	人工合成光触媒のエキス線吸収分光	科研費・触媒科学計測共同研究拠点共同研究費・分子科学研究所共同利用経費
	豊橋技術科学大学・同志社大学・京都大学・神戸大学工学研究科	潤滑油界面の単一分子蛍光追跡	科研費
	京都大学	有機薄膜の構造解析	
	理研 R-CCS	ポリオキソメタレートの研究	科研費
	株式会社 Integral Geometry Science	超高エネルギー密度蓄電池の健全性診断技術と社会インフラへの展開	
	旭化成株式会社	電解槽電極の電流分布計測技術の開発	新規
	京都大学	有機薄膜の構造解析	
反応物理化学	学内(生命分子化学)	EPR によるインスリンの線維化過程の構造解析の解明	
	学内(生命分子化学)	タンパク質コンフォメーション変化を追跡する時間分解 ESR 測定の開発	
	名古屋大学大学院理学研究科	EPR 法による光合成光化学系 II の初期電荷分離機構の解明	
	京都大学大学院工学研究科分子工学専攻	非フラーレンアクセプターによる有機半導体薄膜の光電荷分離機構の解明	
	広島大学大学院工学研究科応用科学専攻	低バンドギャップポリマー薄膜に精製する光電荷分離状態の立体構造解析	
	九州大学分子システム科学センター	室温リン光性を有する有機分子結晶の励起三重項状態の解析	
	東邦大学薬学部 名古屋工業大学	フラビン酵素の段階的光電荷分離機構の解明	
	京都大学化学研究所	有機発光材料の熱活性化遅延蛍光に対する分子振動効果	科研費
	静岡大学大学院工学領域	植物由来色素ペルレリンの光治療薬としての基礎物性評価	分子フォトサイエンス研究センター共同利用
	慶應義塾大学理工学部	分子内一重項分裂機構の解明	分子フォトサイエンス研究センター共同利用

	大阪大学大学院理学研究科 化学専攻	室温有機リン光材料の発光機構の解明	科研費
	奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	有機薄膜太陽電池の電荷キャリアダイナミクス	科研費
	九州大学大学院工学研究院	色素集積体における偏極スピン生成評価	分子フォトサイエンス研究センター共同利用
	昭和薬科大学・薬学部	ピリダジルヘリセンの光反応中間体の評価	分子フォトサイエンス研究センター共同利用
	学内 (有機反応化学)	カルバゾール連結分子の分子内電荷移動状態のダイナミクス	
	学内 (物性物理化学)	金属ドーピングした NaTaO ₃ 光触媒の構造機能解析	
	学内 (生命分子化学)	ABC トランスポーターの分子機構解析	
	静岡大学学術院工学領域	ポルフィリンおよび色素化合物の生体分子光損傷機構	分子フォトサイエンス研究センター共同利用
	立命館大学応用化学科	半導体ナノ粒子による光フォトクロミック反応機構	
	北海道大学 電子科学研究所	ケリン誘導体の一重項酸素発生と捕捉	
	東京工業大学	有機薄膜による光アップコンバージョン機構の解明	科研費
	昭和薬科大	ヘリセン T 型開環反応機構の解明	分子フォトサイエンス研究センター共同利用
	大阪大学産業科学研究所	非フラーレン太陽電池による電荷生成機構の解明	科研費
	東京大学薬学研究科	光触媒型水素原子移動反応の開拓	科研費
	学内 (有機反応化学・生命分子化学)	炭素資源変換を可視化する単一分子反応イメージング技術の開発	科研費
	東京大学大学院総合文化研究科	レドックス型イオン結晶を鋳型とした合金クラスターの発光特性と生成機構の解析	分子フォトサイエンス研究センター共同利用
	横浜国立大学大学院工学研究院	メカノクロミック発光性有機ソフトクリスタルの単一粒子蛍光観測	分子フォトサイエンス研究センター共同利用
	千葉大学大学院工学研究院	超高速電気化学発光を示す DNA ソフトクリスタルの光物性解析	分子フォトサイエンス研究センター共同利用
	学内 (科学技術イノベーション研究科)	ナノシート積層型光触媒膜の異種ナノシート界面における蛍光挙動の解析	分子フォトサイエンス研究センター共同利用
	学内 (生命分子化学・工学研究科・先端バイオ工学研究センター・人間発達環境学研究科)	異分野共創による資源循環イノベーション	
状態解析化学	福井大学遠赤外領域開発研究センター	サブテラヘルツ帯における分子性結晶の格子振動	福井大学遠赤外領域開発研究センター
	静岡大学電子工学研究所	分子性結晶の不完全性とテラヘルツスペクトルとの相関	静岡大学電子工学研究所
	京都大学科学研究所	低分子系バルクヘテロ接合型有機薄膜の構造と電荷分離状態の動力学との相関	分子フォトサイエンス研究センター共同利用
	大阪大学大学院工学研究科	結晶性2次元構造体の電荷キャリア輸送特性評価	分子フォトサイエンス研究センター共同利用

	徳島大学・ポスト LED フォトニクス研究所	金ナノ構造修飾半導体薄膜のテラヘルツ帯超高速応答と光誘起電子移動機構	分子フォトサイエンス研究センター共同利用
	京都大学・大学院理学研究科	微小共振器中の有機半導体の超高速テラヘルツ応答に関する研究	分子フォトサイエンス研究センター共同利用
	新居浜高専	水溶液中における温度応答性高分子の広帯域誘電分光	
	京都大学・大学院理学研究科	微小共振器中の有機半導体の超高速テラヘルツ応答に関する研究	分子フォトサイエンス研究センター共同利用
	北海道大学低温科学研究所	緑色植物における光エネルギー捕集機能の光環境応答	科研費
	東京農業大学生命科学部	カロテノイドの励起緩和ダイナミクス	
	東京理科大学教養教育研究院	クロフィルの励起緩和ダイナミクス	
	静岡大学大学院農学領域	微細藻における光エネルギー捕集機能の環境応答	科研費
	京都大学大学院農学研究科	珪藻の光エネルギー捕集・消光機能	科研費
	京都大学大学院人間・環境学研究科	遠赤光を用いる酸素発生型光合成の機構解明	
	関西学院大学生命環境学部	珪藻の光エネルギー捕集・消光機能	科研費
	神戸薬科大学薬学部	カロテノイドの励起緩和ダイナミクス	
	学内(農学研究科)	光合成細菌の光エネルギー捕集機能	
生命分子化学	大阪大学産業科学研究所	人工設計タンパク質を用いたナノバイオ材料の開発	
	信州大学大学院医学研究科	ミチユア酵素のアミロイド線維に対する効果の検証	
	学内(工学研究科)	膜破壊能を持つ人工設計ペプチドのガン細胞への効果検証	
	学内(医学部保健学科)	新型コロナウイルスを不活化するペプチドの設計	
	大阪大学蛋白質研究所	人工設計ペプチドナノファイバーのクライオ電顕による観測	
	産業技術総合研究所	細胞系を用いたミチユア酵素の活性検証	
	京都大学複合原子力科学研究所	アミロイド線維および形成過程の小角 X 線散乱解析	京都大学複合原子力科学研究所共同利用研究
	浜松ホニクス中央研究所	アミロイド構造識別プローブの蛍光寿命解析	浜松ホニクス株式会社
	長浜バイオ大学	アミロイド凝集初期の DLS 解析	科研費
	大阪大学	トランスサイレチンアミロイド線維化の誘起因子の探索とタウアミロイド線維化の解析	
	HOYA テクノサージカル株式会社	カラムを用いた凝集体除去方法の開発	
	理化学研究所、兵庫県立大学、京都大学、東北大学、和歌山県立医科大学	時間分解 X 線結晶構造解析法およびそれを補完する時間分解顕微分光法の開発と、それらを用いた膜タンパク質の立体構造変化機構の解明	科研費
	岡山大学	光光合成系 II における、光応答構造変化の SFX 解析	科研費
	理化学研究所	ESR および X 線結晶構造解析による ABC トランスポーターの分子機構解析	科研費

	学内(工学研究科)	他分子によるアミロイド線維形成の阻害効果の検証	
	学内(分野内)	α シヌクレインアミロイド線維化の解析	
	自治医科大学	タンパク質凝集物の電子顕微鏡解析	
	東北大学多元物質科学研究所	タンパク質液滴からのアミロイド形成の追跡	科研費
	兵庫県立大学	ガン抑制遺伝子の大腸菌における発現系の構築と機能解析	
固体化学	東北大学金属材料研究所	複合ナノ酸化物の磁気構造の SQUID 顕微鏡観察	
	高エネルギー加速器研究機構	μ SR による複合ナノ酸化物の磁気構造の観察	科研費
	分子科学研究所	超伝導/半導体複合化合物の磁気構造の解明	科研費
	国立研究開発法人物質・材料研究機構	酸化亜鉛薄膜の誘導放出機構の解明	科研費
	国立研究開発法人物質・材料研究機構	超伝導/強磁性体複合化合物の磁気構造の解明	科研費
	国立研究開発法人物質・材料研究機構	二次元層状物質の結晶構造に関する研究	科研費
	電気通信大学	金属錯体の構造および物性の評価	科研費
	明治薬科大学	イオン液体のゲル化剤の開発	科研費
	東京工業大学	複合機能性金属錯体の光応答の評価	
	岡山理科大学	機能性金属錯体のスペクトロスコーピー	
	九州大学先端物質化学研究所	機能性金属錯体の分子軌道計算	
	慶應義塾大学	機能性金属錯体のメスハウアースペクトルの評価	
	分子科学研究所	鉄配位高分子の構造と磁性に与える溶媒吸脱着効果の解明	
	大阪産業大学	メタロセン系物質の合成と構造評価	
	学内(分子フォト)	スイッチング特性を有する金属錯体のテラヘルツ ESR による磁気特性評価	
有機反応化学	松谷化学工業株式会社	希少糖の合成と生物活性研究	松谷化学工業株式会社
	味の素セネラルフーズ株式会社	コーヒーの未解明成分の合成と生物活性研究	味の素セネラルフーズ株式会社
	学内(反応物理化学分野)	カルバゾールを母体とする光触媒の光物性評価	
	長崎大学	光増感剤の光物性評価	
	トヨタ自動車株式会社	二酸化炭素の有用化合物・素材への精密分子変換を光反応で可能にする高機能性触媒の開発	トヨタ自動車株式会社
	株式会社ナティアス	核酸連続生産装置の開発	Go-Tech 事業
有機分子機能	滋賀医科大学	医療材料の開発	
	学内(物性物理化学)	新規化合物の分子構造解析および有機化合物の構造と反応解析	

(2) 国際共同研究の記録

表3－(2)．国際共同研究の記録

教育研究分野	国 名	所 属 機 関	研 究 内 容	研究資金の出所
物性物理化学	ドイツ	Karlsruhe Institute of Technology	金属ドーピングした NaTaO_3 光触媒の赤外分光計測	科研費
	オーストリア	ウィーン大学	人工光合成光触媒の和周波分光	科研費
	中国	北京大学	氷界面の走査プローブ顕微鏡計測	科研費
反応物理化学	アメリカ	シカゴ大学化学科	EPR 法による光合成反応中心の初期電荷分離機構の解明	
	ドイツ	フライブルク大学物理化学科	クリプトクロムにおける段階的電荷分離機構の解明	
	フィンランド	タンペレ大理工	分子内一重項分裂機構の解明	
	台湾	国立台湾科技大学化学工学部	マイクロプラズマ法を用いたナノ材料合成	
状態解析化学	台湾	国立台湾大学・凝態科学研究センター	分子性結晶・結晶性高分子のテラヘルツ分光と量子化学計算	
	インド	インド工科大学カンプール校	超高速レーザー分光による深共晶溶媒の動的挙動と微視的構造に関する研究	学術振興会 二国間交流事業
	中国	中国科学院新疆物理化学研究所	テラヘルツ波分光と密度汎関数理論による分子性結晶の低振動モードの研究	
	ポルトガル	Universidade Nova de Lisboa	乾燥環境下における植物の光防御メカニズム	
	ロシア連邦	ロシア科学アカデミー	赤外光を用いる酸素発生型光合成の機構解明	
	オーストラリア	シドニー大学	赤外光を用いる酸素発生型光合成の機構解明	
固体化学	カナダ	ブロック大学	酸化還元配位子からなる金属錯体の物性に関する研究	科研費他
	フランス	サヴォア・モンブラン大学	縮退半導体の光励起ダイナミクスに関する研究	
	ドイツ	European XFEL	スピנקロスオーバー錯体の光励起構造の時間分解解析	
	ドイツ	Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter	スピנקロスオーバー錯体の光励起構造の時間分解解析	
	カナダ	トロント大学	スピנקロスオーバー錯体の光励起構造の時間分解解析	
生命分子化学	フィリピン	フィリピン国立大学ロスバニョス校 Institute of Chemistry	ヒト癌抑制 101F6 タンパク質と金・銀ナノ粒子との相互作用とヒト癌細胞への効果	フィリピン
	台湾	国立陽明交通大学	タンパク質水溶液のレーザー照射効果の解析	
	アメリカ	カリフォルニア工科大学ベックマン研究所	タンパク質フォールディングの速度論的解析	
	アメリカ	サンノゼ州立大学	ヘムタンパク質の光誘起電子移動反応による鉄還元活性解析	

	オーストラリア	オーストラリア国立大学	低分子分子シャペロンの抗凝集効果の解析	
有機分子機能	中国	内蒙古医科大学 モンゴル医薬学院	モンゴル薬の研究開発と社会利用	
	中国	内蒙古医科大学 附属病院	機能性色素分子の開発と医薬および環境化学への応用	
	中国	内蒙古医科大学 薬学院	(1)機能性色素分子の開発 (2)内蒙古の鉱物を用いる有機合成法の開発	
	中国	内蒙古師範大学	内蒙古の鉱物を用いる有機合成法の開発	
	中国	内蒙古工業大学	レアースを用いる機能性材料の開発	
	中国	内蒙古大学	機能性分子の構造解析	
	中国	内蒙古科学技術大学	機能性色素分子およびマテリアルの開発及びレアースを用いる C1 化学反応の開発	
	中国	内蒙古農業大学	フッ素材料による環境汚染の化学的検出と除去技術の開発	
	エストニア	Tallinn University	機能性キラル超分子マテリアルの開発	
	中国	四川大学	機能性超分子の開発	
	中国	梯希愛(上海)化成工業発展有限公司	機能性材料の開発	梯希愛(上海)化成工業発展有限公司

(3) 学術集会の開催

表3－(3)．学術研究集会開催の記録

学術集会名 (種類)	主催者/ 共同主催者 (所属機関)	場所	時期	参加人数 (外国人 参加者 数)	主な発表者、招待 講演者名 (所属)
光合成ミナ- 2023：反応中 心と色素系の多様性 (セミナー)	秋本誠志、大 岡宏造 (阪 大)、大友征 宇 (茨城大) ほか	名古屋工 業大学 4 号館ホー ル	2023. 6. 2 4-25	80	成川礼 (東京都立 大)、木村行宏 (神戸大)
2023 年度 日本分光学会 年次講演会	笠原俊二、服 部利明 (筑波 大)、吉越章隆 (原子力機構)	神戸大学 百年記念 館・瀧川 記念学術 会館	2023. 10. 4-6	173 (11)	河田聡 (ナノフォト・大 阪大・理研)、長谷 川健 (京大化研)、 洪鋒雷 (横浜国大)
神戸大学分子フォトサイ エンス研究センター研究 会・第 5 回広帯域極限電 磁波生命理工連携研究会	分子フォトサ イエンス研究 センター (世 話人・立川貴 士)	理学部 Z201・ 202 室	2023. 12. 19	約 40	鈴木肇 (京大)、 小林厚志 (北 大)、他 5 名
第 36 回 近畿エイズ研究 会学術集会	日高興士 (神戸 大)、田村厚 夫 (神戸大)	理学研究 科	2023. 6. 1 0	40	特別講演 玉村啓 和 (東京医科歯科 大) 「HIV 研究か ら SARS-CoV-2 阻害 剤の創製へ」
第 14 回 関西 6 研究室合 同研究会	津田明彦/ 前田 大光 (立命館 大)、羽村 季之 (関西学院大)、 福原学 (東京工 業大)、沼田宗典 (京都府立大)、 甲元 一也 (甲南 大)	関学梅田 キャンパス	2023. 9. 16 -18	69	津田明彦、参加学生 全員
学振拠点形成事業「テラヘ ルツ分子科学アジア研究拠 点」第1回全体シンポジウム	富永圭介	神戸大学 瀧川学術 交流会館	2024. 3. 14 -16	80	Amalendu Chandra (インド工科大学カン プーール校)、林倫年 (国立台湾大学)、 Alvin Karlo Tapia (フ ィリピン大学ロスバニ ヨス校)

(4) 雑誌編集委員

表3－(4)．学術雑誌編集員

氏名	雑誌名	期間
内野隆司	Journal of Materials Science: Materials in Electronics	14. 3.1 - 継続中
大西 洋	e-Journal of Surface Science and Nanotechnology 編集委員	17.4 - 継続中
	Surface Science Report, Commisionning Editor	19.1 - 継続中
小堀康博	Scientific Reports/Nature Publishing Group	17.9.1 - 継続中
高橋一志	近畿化学工業界「きんか」誌	14. 3. 1 - 継続中
	Inorganics	17.9.1 - 継続中
茶谷絵理	Biochimica Biophysica Acta Proteins and Proteomics	13.1.29- 継続中
	Journal of Biochemistry	22.1.1- 継続中

(5) 研究支援体制

2023年度は、(1)スタッフの表にあるように、学術研究員として4名、理学研究科研究員として1名、理学研究科研究協力員として2名を受け入れた。

(6) 個別研究活動の記録

“個別研究活動の記録”として別紙を作成。

(7) 社会的な講演

表3－(7)．社会的な講演の記録

氏 名	講 演 題 目	集 会 名	日 時	場 所
秋本誠志	学校設定科目 「創造応用 I」	兵庫県立兵庫高校	23.5.24～ 24.2.21	兵庫県立兵庫高 校
木村哲就	「化学反応のリアルタイム 観察」「タンパク質のダイ ナミクスと機能を解き明 かす」	「宮水学園」サイエンス 講座	24.2.9～ 24.3.1	鳴尾公民館
津田明彦	光オンデマンドホスゲン 化学反応について	講演会	23.9.22	旭化成
	「イソシアネートを使わな いポリウレタンの合成：反 応と機能制御」	技術情報協会セミナ ー	24.1.18	オンライン開催
	シンポジウム「ヒューメイ ンな化学～脳・精神・感 覚の世界に化学はどう挑 むか～」	2023 年度第 1 回日本 化学連合シンポジウム	24.1.22	オンライン開催
松原亮介	遷移金属を用いない CO ₂ 光還元反応	第 98 回触媒化学融 合研究センター講演 会	23.8.28	触媒化学融合研 究センター

持田智行	遷移金属を含む多彩な機能性液体	第8回材料相模セミナー	23.11.29	相模中央化学研究所
------	-----------------	-------------	----------	-----------

(8) 学会賞等

表3-(8). 学会賞等受賞の記録

氏 名 (指導教員名)	受 賞 研 究 題 目 等	賞 名	授 賞 団 体 名
大西 洋	財務上の貢献	令和5年度神戸大学学長表彰	神戸大学
木村建次郎	財務上の貢献	令和5年度神戸大学学長表彰	神戸大学
立川貴士	財務上の貢献	令和5年度神戸大学学長表彰	神戸大学
	単一粒子反応解析に基づく高効率光エネルギー変換系の構築	第37回光化学協会賞	光化学協会
津田明彦	光オン・デマンド合成法によるバイオ由来医薬品原薬と中間体の製造販売	関西スタートアップインキュベーションプログラム「起動2期」	大阪産業局
松原亮介	優れた授業・教育方法を評価基礎有機化学 1,2	令和5年度前期全学共通教育ベストティーチャー賞	神戸大学
	高難度光還元反応を実現するカルバゾール光増感剤の開発と機能展開	第21回有機合成化学協会関西支部賞	有機合成化学協会 関西支部
楠本遼太 (小堀康博)	Time-Resolved EPR Study on Conformational Changes in Triplet-Triplet Dissociation and Annihilation after Intramolecular Singlet Fission	ACS The Journal of Physical Chemistry Letters Poster Award	Plasmonic Chemistry Society of Japan
楠本遼太 (小堀康博)	分子内一重項励起子分裂で生成する三重項励起子対の構造変化と三重項消滅:時間分解EPR と過渡吸収による解析	高知化学シンポジウム 2023 優秀ポスター発表賞	高知化学会、高知工科大学 総合研究所 分子デザイン研究センター／構造ナノ化学研究センター
竹内愛斗 (立川貴士)	ペロブスカイト光触媒における界面電荷移動速度と水素生成活性の相関	高知化学シンポジウム 2023 優秀ポスター発表賞	高知化学会、高知工科大学 総合研究所 分子デザイン研究センター／構造ナノ化学研究センター
中明 育 (内野隆司)	Mg/MgO/MgB2 フラクタルナノ複合体の超伝導特性に及ぼす界面構造とMgB2 含有量の効果	日本セラミックス協会秋季シンポジウム学生優秀講演賞	日本セラミックス協会
	超伝導/常伝導フラクタルナノ複合化合物の自発的渦糸形成	第29回渦糸物理ワークショップ学生優秀発表賞	第29回渦糸物理ワークショップ
古谷実祐 (秋本誠志)	行列計算を用いた励起エネルギー移動の解析 ～光合成色素タンパク質の機能解明	第12回サイエンスフロンティア研究発表会優秀発表賞	神戸大学
村山加純 (小堀康博)	有機薄膜太陽電池における電荷輸送機構への非フラーレン型アクセプターの立体構造の効果	高知化学シンポジウム 2023 優秀ポスター発表賞	高知化学会、高知工科大学 総合研究所 分子デザイン研究センター／構造ナノ化学研究センター

柚 佳祐,茶谷 G (茶谷絵理)	ウシ由来インスリンのアミロイドオリゴマーおよびプロトフィブリル形成のモデリング	第 61 回日本生物物理学会 学生発表賞	日本生物物理学会
---------------------	---	----------------------	----------

(9) 著書数・査読論文数・講演数(国際・国内)の記録

表3-(9). 著書数・査読論文数・講演数(国際・国内)の記録(2023.4－2024.3)

(*分子フォトサイエンス研究センター、+数理・データサイエンスセンター)

	著 書 数	査読付論文数	MISC 件数	国内学会発表数	国際学会発表数
秋本誠志		1	1	12(1)	1
内野隆司		5		12	
枝 和男				2	
大西 洋		3		8	9(4)
*笠原俊二				8	2
+木村建次郎			2	17(7)	1
木村哲就				7(3)	2(2)
*小堀康博	1	5		19(3)	7(4)
*立川貴士	1	1		22(1)	2
高橋一志		2		16	2
田村厚夫	1	2		5	2
茶谷絵理		5		14(2)	1(1)
津田明彦	1	5		8(5)	
*富永圭介		3			
林 昌彦		1		1	
松原亮介		3		7(4)	1(1)
持田智行		5		17(4)	3(1)
和田昭英				3	

(招待講演の内数を括弧内に記載)

個別研究活動の記録(2023年度)

目次

1. 物理化学講座	2
1-1. 分子動力学.....	2
[1] 和田 昭英.....	2
[2] 笠原 俊二.....	5
1-2. 物性物理化学.....	7
[3] 大西 洋	7
[4] 木村 建次郎	10
[5] 枝 和男	12
1-3. 反応物理化学.....	13
[6] 小堀 康博	13
[7] 立川 貴士	18
2. 無機化学講座	21
2-1. 固体化学	21
[8] 持田 智行	21
[9] 内野 隆司	23
[10] 高橋 一志	27
2-2. 状態解析化学.....	30
[11] 富永 圭介	30
[12] 秋本 誠志	32
3. 有機化学講座	34
3-1. 有機反応化学.....	34
[13] 林 昌彦	34
[14] 松原 亮介	36
3-2. 生命分子化学.....	38
[15] 田村 厚夫	38
[16] 茶谷 絵理	40
[17] 木村 哲就	43
3-3. 有機分子機能化学.....	46
[18] 津田 明彦	46

1. 物理化学講座

1-1. 分子動力学

【 1 】 和田 昭英

課題 1：反応解析・制御のための新規分光技術の開発ー光反応経路ネットワークの俯瞰的観測ー

現代社会の抱える環境問題やエネルギー問題を解決するための一つの柱として、太陽光の利用が挙げられる。その中でも太陽光を用いた光化学反応は、太陽電池や光触媒・人工光合成など現在の人類の抱える問題を解決する技術の根幹を為すものである。これら太陽光を利用する技術において、その光化学過程の反応メカニズムに関する知見はエネルギー生産の高効率化や可視光領域の利用といったエネルギー生産性の向上につながる重要な役割を果たす。これら光化学システムの理解で有効な研究手法の一つとして、超高速分光法による反応追跡が挙げられる。この手法では、フェムト秒～ピコ秒の超短パルス励起で生じた光化学的イベントを同程度の時間幅のプローブパルスを使って観測することで、光化学反応経路上の励起状態や反応中間体などを実時間で観測していくことが可能である。しかし、この手法は単色光励起によって生じた光化学的イベントの観測に特化した手法であると同時に、パルス光を用いているために太陽光照射下のような光定常状態の反応機構を調べるには不十分である。さらに、太陽光利用技術では太陽光という連続白色光をエネルギー源としており、そこでは波長の異なる光による光励起が様々な経路で多段階で進行していることが予想される。

本課題では、光定常状態にある反応系の多色多段階励起反応をターゲットとしており、そのような定常状態にあるネットワーク状の光化学反応経路網の全体像を俯瞰して観測し、理解することを目的としている。具体的には、単色レーザー光を用いた単色の多段階反応や、複数のレーザー光やフラッシュランプなどから得られる紫外可視白色光を用いた多色励起によって進行する多色多段階の光化学的イベントを、1段階励起過程に限らず2段階や3段階といった高次項、そして異なる波長の光が関与した交差項を励起光波長選択的に観測する様々な手法の開発を行っている。

1. 多色多準位反応系のマスター方程式を用いた解析

本研究では、マスター方程式に基づいて光定常状態シフトの解析を行うことで、多色多準位系における反応経路網の理解を深めることを目的とした。本研究で検討した反応に関与する準位数と反応条件を大きく分類すると表1-1のようになる。従来主に扱われてきた反応系は、2準位系におけるポンプ・プローブ測定のような表1-1の(A)に相当するものであり、2準位系における緩和を扱ったものである。一方、本研究では、3準位以上が関与する系の緩和 (C) と光定常状態 (D) について検討した。実際の測定に先立ち、まずは多準位系における行列形式のマスター方程式に関する議論によって、N 準位系の光定常状態シフトは $N-1$ 個の成分によって記述されることを示し、マスター方程式を対角化して得られる固有値と観測によって取得可能なパラメータとの関係を明らかにした。そして、具体的な系として (B) 2準位系の光定常状態および3準位系における (C) 緩和の挙動や (D) 光定常状態シフトについてシミュレーションを交えた考察を行い、反応に関与する異性体が2種の場合と3種の場合での観測される現象の違いを示した。特に、3準位系の光定常状態シフトに関して単成分性を仮定すると、測定されるパラメータには観測波長依存性が生じることが確認された。また、多準位系に

表 1-1 関与する準位数と反応条件の分類

	緩和のみ (励起光無し)	光定常状態 (励起光有り)
2準位系	A	B
n準位系 ($n \geq 3$)	C	D

おける光定常状態シフトでは、条件によっては、光定常状態へと漸近していく挙動が指数関数的挙動から外れて振動解を持つことを見出した。以上のように、減衰定数だけでなく、振動周波数といった特徴量が多色多準位の異性化経路網について検討を行う際に有用であることを見出した。

2. フーリエ変換型多段階反応観測システムの作製

これまでの測定システムでは、ファブリー・ペロー干渉計を用いた2色レーザー励起による交差項（2色の光が関与した光反応励起経路）の選択的な観測や、タンデム型ファブリー・ペロー干渉計やマイケルソン干渉計で白色光励起における多色多段階励起の選択的観測を行ってきた。しかし、実験・検証を進めるに従い、これらのシステムにはいくつかの改善すべき問題点が浮き彫りになった。その一つとして、①ファブリー・ペロー干渉計の持つ特性により、変調波形に正確な正弦波からのズレが生じる点がある。そのため、交差項の選択的検出は実現できても高次項（単色光が複数回関与した多段階光反応励起経路）の選択的な観測は困難であった。もう一つの問題点として、②ファブリー・ペロー干渉計の位相制御の問題がある。ファブリー・ペロー干渉計やマイケルソン干渉計では、干渉計に用いている鏡の位置をピエゾ素子を使ってナノメートルオーダーで制御する必要があるが、周囲の温度変動やピエゾ素子のドリフトの影響で十分な鏡の位置再現性が得られず、正確な位相を決めることが困難であった。さらに、③ピエゾ素子の位置分解能安定性が不十分なため、励起光の波長によっては3段以上の高次項を観測するのは困難である。

本研究では、以上で述べた三つの問題点を克服するために、干渉計の代わりに回転ステージに回転型のNDフィルターを組み合わせた変調システムを組み込むことで、光定常状態における異性体分子種の吸光度変化を測定するシステムを構築した。この改善により変調励起の際の安定性が格段に向上した。その結果、得られたインターフェログラムの対称化やインターフェログラムのレプリカを繰り返してつなげることによるフーリエ変換時の周波数分解能の高分解能化が可能となった。本研究では右図に示したシステムを構築した。励起光として波長405nmと532nmの連続光を用い、それぞれを試料の応答速度よりも十分に遅い異なる周波数（405nm：0.1Hz，532nm：0.125Hz）で変調した後に試料（p-アミノアゾベンゼン，AAB）に照射し、試料の光定常状態のシフトをプローブ光の吸収変化のインターフェログラムとして検出した。得られたインターフェログラムは、先ほど述べた対称化やレプリカ法を施した後にフーリエ変換することで、図2に示す様な反応のアクションスペクトルを得た。図において正負の信号はAABのトランス体の増加と減少を意味している。したがって、405nm励起光(ω_1)はAABのトランス $\rightarrow$ シスの光異性化反応を駆動し、532nm励起光(ω_2)は反応を抑える働き（逆反応を駆動）があることが分る。また、405nm励起光の2次項($2\omega_1$)が正に出ていることから405nm駆動の反応は光量を上げると反応の進みが鈍る（飽和効果）ことが分る。さらに、交差項である和周波($\omega_1+\omega_2$)・差周波成分($\omega_1-\omega_2$)が正の位相を持つことから、405nmと532nmの両方の励起光が関与した反応経路が存在し、その経路は反応の進みを鈍らせることが分る。

本研究で得られた結果は、反応経路のモデルに依存しない言わばモデルフリーな解析で得られた結

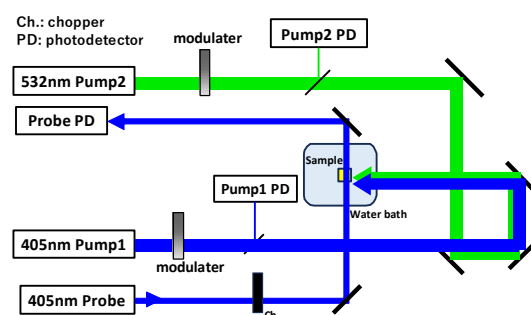


図1. 実験装置

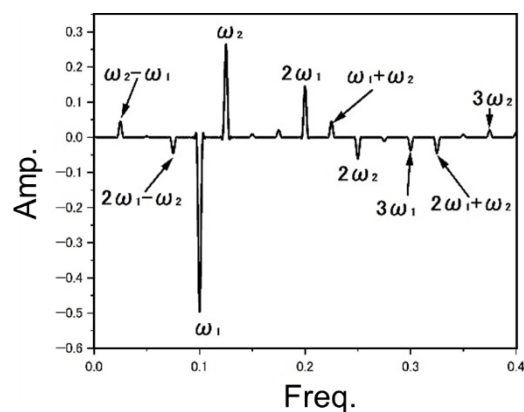


図2. アクションスペクトル

果であり、変調励起の応答に含まれる周波数成分から一意に決定される。そのため、今後未知の反応経路を持つサンプルに対してもモデルに依存せずに測定が可能であると考えている。

課題2: ラマン分光法を用いたp-アミノアゾベンゼンの反応経路網の解析

アミノアゾベンゼン(AAB)は、trans体もcis体も吸収帯が可視領域にあり、両者の重なりが大きいので、波長400nm付近の単色励起においてはtrans体とcis体の両方の励起が同時に起きて、光定常状態が生成される。また、波長500nm以上の領域ではcis体の吸収がtrans体を上回るようになるので、2色励起により光定常状態の制御が可能になると期待される。しかし、その場合に重要となる量子収率や異性化比率に関する報告、特にcis体に関する報告されていない。

本研究ではピークがシャープで分子構造に敏感なラマン分光法を用いて反応の特徴量の観測・解析を行った。図3(a)に示すように、トランス体とシス体とではスペクトルの様子が大きく異なり、2つの異性体の識別が可能になる。そのために、まずは光定常状態での測定が可能になるように、励起光を照射下での試料をラマン分光法によって測定するためのシステムを構築した。そして、等吸収点である452nmの励起光照射下におけるtrans体のラマンピーク強度の励起強度依存性を測定し試料の光定常状態や光定常状態シフト(定常状態の変化)を直接観測することで光異性化比率の定量化に成功した。図3(b)に示すように励起光照射の有無でtrans体のピーク強度が大きく減少し、そのピーク強度比からシス体の異性化効率は0.48となった。この効率は5mW以上の励起強度でほぼ一定であり、マスター方程式に基づいた考察より、熱異性化速度が光異性化速度よりも十分遅いことによると結論付けられる。

トランス体を励起した場合のシス体への異性化に関する量子収率は、暗条件からの励起直後のシス体の増加速度(=トランス体の減少速度)と光吸収による光子数の消滅速度の比で求められる。後者は吸収係数から見積もることができる。前者は図4に示した様に、励起直後($t=0$)のトランス体のピーク強度の減少率を、指数関数フィッティングにより見積もることができる。得られた結果は $\phi = 0.34$ であった。

シス体を励起した場合のトランス体への異性化に関する量子収率の見積もりに関しては、等吸収点での励起がキーポイントになっている。光異性化により分子数が変化すると吸収される光量も変化するの、シス体による吸収を見積もるのが困難な場合が多い。しかし、等吸収点(波長452nm)で励起を行っているの、トランス体とシス体の比が変化しても吸収係数は変化しない。また、トランス体の減少量もラマンピーク強度から見積もられているの、シス体による吸収を見積もることが可能となる。今回の場合、光定常状態におけるシス体の存在比率は0.48なので、シス体による吸光度も等吸収点(452nm)における吸光度の48%と見積もることができる。また、光定常状態ではシス→トランスの反応速度とトランス→シスの反応速度は等しくなっているので、トランス体の反応速度から見積もることが可能になる。以上の事から、シス→トランスの光異性化(@452nm)における量子収率は0.44と見積もられた。

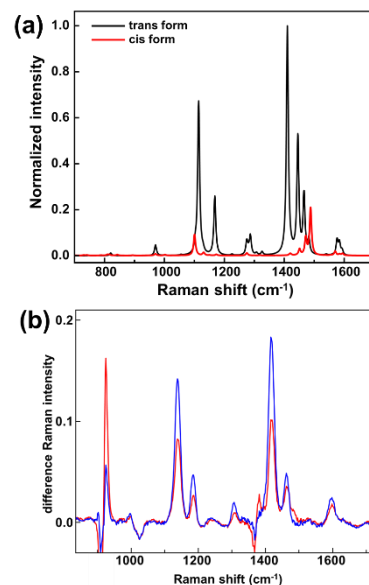


図3. AAB のラマンスペクトル
(a) TD-DFT 計算スペクトル、黒線:トランス体、赤線:シス体
(b) 実測スペクトル、励起光照射前(青線)、照射中(赤線)

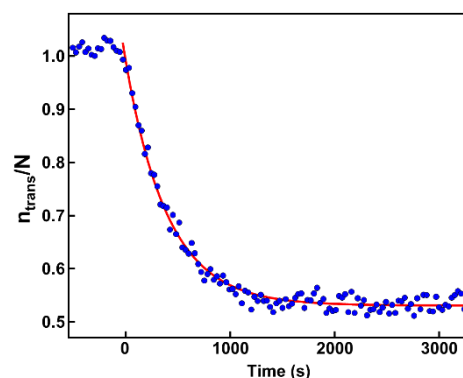


図4. トランス体ピーク強度の時間変化

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. Isomerization pathways in four isomer reaction system of azobenzene derivative SR7B with multi-color excitation
Akimasa Yamamoto, Akihide Wada Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics 2023年6月 英語 ポスター発表
九州大学 国内
2. Raman spectroscopic analysis on Photoisomerization reaction of 4-aminoazobenzene Ryosuke Takagi, Akihide Wada
Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics 2023年6月 英語 ポスター発表 九州大学 国内
3. 4種の異性体を持つアゾベンゼン誘導体SR7Bにおける多色多段階異性化経路網のマスター方程式を用いた解析
山本晟雅, 和田昭英 光化学討論会 2023年9月 日本語 ポスター発表 広島国際会議場 国内

【 2 】 笠原 俊二

課題: 高分解能レーザー分光による励起分子の構造とダイナミックスの解明

単色性の良いレーザー光を用いた超高分解能レーザー分光では、従来の分光器やパルスレーザーによる分光法では得られない高分解能な分光研究が可能であり、分子の励起状態について詳細な情報を得ることが期待できる。本研究では高エネルギー分解能性を活用して励起状態を電子・振動・回転準位まで分離して観測する点と、観測したスペクトル線の絶対波数を 0.0001 cm^{-1} (有効数字9桁) の高い精度で計測することが大きな特徴である。高分解能ゆえに、個々のスペクトル線の微小な線型・線幅・強度などの変化を観測することが可能となり、これらの変化を通して状態間相互作用を理解することにより、励起状態の寿命・分子内エネルギー移動、分子の光解離反応等の動的挙動・ダイナミックスを発見・解明することが期待できる。

(1) 可視光領域における NO_2 ラジカルの高分解能レーザー分光

NO_2 ラジカルは大気化学において重要な反応中間体として知られ、大気におけるオゾンバランスや酸性雨の原因物質として環境科学や大気化学の分野で興味深い分子であるとともに、状態間相互作用を解明する上で学術的にも興味深い系である。これまでに数多くの研究がなされているが、本研究では高分解能であることを生かして超微細相互作用による微小な回転線の変化から状態間相互作用を捉えようとするものである。可視領域に存在する A-X 電子遷移について数多くの振電バンドの観測を行った結果、 16200 cm^{-1} を超えた領域においていくつかのバンドの超微細分裂に異常が見られたため、その影響が顕著な 16218 cm^{-1} バンドの回転構造の全体像を観測して、回転構造に局所的なエネルギーシフトやスペクトル線の分裂の異常などを見出した。これは近傍に存在すると予測されている他の電子状態との相互作用であると考えられる。

(2) アセトアルデヒドの高分解能レーザー分光: 分子内大振幅振動に関する研究

これまでに観測されたアセトアルデヒドの高分解能スペクトルの帰属と解析を引き続き行った。観測されたスペクトルはこれまでの報告例より分解能が一桁向上しており、より精度の高い回転定数を見積もることができた。しかし、アセトアルデヒドのメチル内部回転と水素原子の面外振動におけるトンネル効果により分子回転が大きく影響を受けるため、それらの大振幅振動と分子回転を同時に取り込んでエネルギー準位を考える必要があり解析を進めている。また、高分解能ゆえに、これまでに発見されていない回転準位の局所的なエネルギーの乱れとスペクトル線の分裂を新たに見出すことに成功した。これを近傍の振電状態との相互作用によるものと考え、相互作用の大きさを見積もることに成功した。

(3) *trans*-スチルベンの高分解能レーザー分光: 分子の異性化と構造に関する研究

励起状態で *cis-trans* 転移が起こることが見出されているスチルベン分子について $S_1 \leftarrow S_0$ 遷移の高分解能蛍光励起スペクトルの観測を行った。 S_1 状態の蛍光寿命が短いため回転線は完全に分離していないがシミュレーションとの比較により励起状態および基底状態のそれぞれの分子定数を見積もることに成功した。その結果、基底状態で平面構造と考えられていた *trans*-スチルベン分子が 2 つのベンゼン環がお互いにややツイストしている構造である可能性が示唆された。このことは、理論計算からも支持されている。 $0-0$ バンド以外にも 2 つの振動励起状態の振電バンドの観測も行い、シミュレーションによる回転構造の解析を行いつつあり、分子構造に関してさらなる確証を得ようとしている。

(4) フルオレンおよびカルバゾールの回転構造解析

これまでに観測したフルオレンおよびカルバゾールの $S_1 \leftarrow S_0$ 遷移の $0-0$ バンドおよび幾つかの振電バンドの高分解能スペクトルの回転線の帰属および解析をスペクトルシミュレーションプログラムを用いて行った。フルオレンについては、高次の項は必要なかったが、カルバゾールでは遠心力歪みによる高次の補正項まで決定することができた。また、フルオレンについては、 $0-0$ バンドの 204 cm^{-1} 高波数のバンドで見出された局所的なエネルギーシフトについて、摂動を含めたスペクトルシミュレーションを試みている。一方、カルバゾールでは同様のエネルギーシフトは見られず、さらに高波数領域での相互作用を見つけるべく研究を進めている。

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. Research of *trans*-stilbene by high-resolution laser spectroscopy of the $S_1 \leftarrow S_0$ transition.

A. Shimizu, S. Kasahara, M. Baba, and N. Nakayama 38th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics 2023 年 6 月 英語 ポスター発表 福岡 国際

2. The study of *trans*-stilbene $S_1 \leftarrow S_0$ transition by using High-Resolution Laser Spectroscopy.

A. Shimizu, S. Kasahara, M. Baba, and N. Nakayama 7th Asian Workshop on Molecular Spectroscopy, 2023 年 11 月 英語 口頭発表(一般) 北海道大学 国際

3. NO_2 ラジカル A-X 遷移 16218 cm^{-1} バンドの高分解能レーザー分光”

多田康平、南出歩果、吉澤匠、笠原俊二 第 17 回分子科学討論会、2023 年 9 月 日本語 口頭 大阪大学 国内

4. 分子線による *trans*-スチルベンの $S_1 \leftarrow S_0$ 遷移の高分解能レーザー分光”

清水陽、笠原俊二、馬場正昭、中山尚史 第 17 回分子科学討論会、2023 年 9 月 日本語 口頭 大阪大学 国内

5. 単一モード紫外レーザーによるアセトアルデヒドの $S_1 \leftarrow S_0$ 遷移の高分解能レーザー分光”

谷口凜、中島康輔、清水陽、笠原俊二、馬場正昭 第 17 回分子科学討論会、2023 年 9 月 日本語 ポスター 大阪大学 国内

6. フルオレンの $S_1 \leftarrow S_0$ 電子遷移の高分解能レーザー分光”

ミニック留久、黒田真司、笠原俊二 第 17 回分子科学討論会、2023 年 9 月 日本語 ポスター 大阪大学 国内

7. カルバゾールの $S_1 \leftarrow S_0$ 遷移の高分解能レーザー分光

大岩本昇太、上田翔也、黒田真司、笠原俊二 第 17 回分子科学討論会、2023 年 9 月 日本語 ポスター 大阪大学 国内

8. 分子線による *trans*-スチルベンの電子遷移の高分解能レーザー分光

清水陽、笠原俊二、馬場正昭、中山尚史 2023 年度日本分光学会年次講演会、2023 年 10 月 日本語 ポスター 神戸大学 国内

9. 分子線を用いた高分解能分光法による *trans*-スチルベンの $S_1 \leftarrow S_0$ 遷移の研究

清水陽、笠原俊二、馬場正昭、中山尚史 第 23 回分子分光研究会、2023 年 11 月 日本語 口頭 福岡大 国内

10. 高分解能分光法によるアセトアルデヒドの大振幅振動の研究

谷口凜、中島康輔、清水陽、笠原俊二、馬場正昭 第23回分子分光研究会、2023年11月 日本語 口頭発表(一般) 福岡大 国内

1-2. 物性物理化学

【3】 大西 洋

大西はクロスアポイントメント制度を利用して自然科学研究機構分子科学研究所の教授を2021年11月から5年間兼任して「有限の厚さをもつ固液界面のオペランド分子科学研究」を推進している。兼任比率は本学75:分子科学研究所25である。ここでは神戸大学と分子科学研究所でおこなった研究を一括して報告する。

研究課題: 人工光合成光触媒のダイナミクス研究

光触媒は結晶内部で吸収した光のエネルギーを励起キャリア(電子と正孔)に変えて、表面に存在する反応中心へ伝達し、物質変換(酸化還元反応)に利用する人工的なデバイスである。水から電子を取り出す半導体光触媒が半世紀にわたる材料探索のなかでいくつも見いだされてきた。これらを改良して社会実装しようとする開発研究が世界中でおこなわれている。その一方で、光触媒のサイエンスを探究する基礎研究は古くから知られた光触媒材料に集中しており、ここに生じた材料ギャップ(material gap)を埋めようとする研究は少ない。

大西は本専攻反応物理化学分野の小堀康博教授・分子科学研究所の長坂将成助教・京都大学の浦上浩輝特定助教に研究分担者として参画いただいた科学研究費基盤研究(A)「人工光合成をめざす半導体光触媒: オペランド計測によるミリ秒反応化学の解明」を2022年度から実施している。世界最高レベルの量子収率で水を水素と酸素に完全分解する二つの半導体光触媒(チタン酸ストロンチウム SrTiO_3 とタンタル酸ナトリウム NaTaO_3)が、水を酸素と水素に分解する物質変換メカニズムを比較して共通点と相違点を抽出し、高活性半導体光触媒の設計指針を提案することが目標である。

2023年度の成果(1) マイクロ電極による高速酸素検出: タンタル酸ナトリウム光触媒による水の全分解反応によって水中に放出される溶存酸素を直径20 μm の白金電極を光触媒ディスクから100 μm まで接近させて電気化学的に検出した。水素生成反応をアシストする助触媒を担持していない光触媒にLED励起光(波長285 nmの連続光)を照射すると電極電流(すなわち電極近傍の酸素濃度)が減少した。光触媒中で励起した電子が溶存酸素を還元してスーパーオキシドアニオンラジカルを生成する反応が NaTaO_3 表面で進行し、光触媒ディスク近傍の溶存酸素濃度が低下したと解釈した。スーパーオキシドアニオンラジカルは過酸化水素に転換し、最終的には酸素分子を再生するが、励起電子が水ではなく溶存酸素を還元することによる損失(量子収率の低下)は避けられない。酸素生成反応に直接関与しない水素生成助触媒が、光触媒による酸素還元を抑制する役割を果たすことを明らかにした。

2023年度の成果(2) 放射光を用いた軟エックス線吸収分光: 分子科学研究所UVSOR(BL3UとBL4B)において、アナターゼ型酸化チタン光触媒の酸素K吸収端スペクトルを測定した。光触媒をバンドギャップ励起する水銀ランプの迷光が蛍光エックス線信号に混入しないよう注意して測定をおこなって、酸素K吸収端スペクトルが励起光照射に有意に応答することを見いだした。

研究課題:潤滑油界面の分子論的理解

カンチレバーの共鳴振動数変化を検出する方式の原子間力顕微鏡(FM-AFM)を用いて、顕微鏡探針にはたらく力をピコニュートンの精度で計測すると、固体表面の凹凸像ばかりでなく、固体に接する液体の微視的構造を明らかにできる。潤滑油の機能を分子スケールで理解するために、固液界面の力学応答を計測するFM-AFMの特徴を活かす可能性を探索した。この研究はFM-AFMの産業応用を拓くという視点から(株)島津製作所と共同で進めている。

さらに広い視野から潤滑界面を研究するために、単一分子蛍光追跡を潤滑油中で実施するフィージビリティスタディを手老龍吾准教授(豊橋技術科学大学)・平山朋子教授(京都大学)・天野健一准教授(名城大学)・松本拓也講師(本学工学研究科)と共に科学研究費挑戦的研究(萌芽)の支援を得て2021-2023年度に実施した。生体膜の流動性を評価する目的でもつばら水溶液中でおこなわれてきた単一分子蛍光追跡を潤滑油研究のツールとして活用することが目的である。

2023年度の成果(1)水中生体膜の流動性計測に活用されてきた単一蛍光分子追跡法を潤滑油の分子運動計測に転用して、潤滑油とガラスの界面に捕捉された蛍光分子ひとつひとつによる点発光を光学顕微鏡による動画像として記録し、発光点数の変化を定量的に再現する数理モデルを構築した。

2023年度の成果(2)潤滑油に溶解する蛍光マーカー化合物としてこれまで使用してきたBODIPY系化合物には焼尽(励起光照射によって蛍光マーカー化合物が壊れて蛍光を発しなくなる)が起こりやすい欠点があった。焼尽しにくいスピロビフルオレン系化合物をチーム内で有機化学合成し、蛍光顕微鏡による計測に利用した。

研究課題:液体—氷界面の分子イメージング

氷はさまざまな分子性結晶の中で、私たちにもっとも関係深い物質であり、サイエンスとエンジニアリングにおけるその重要性は計り知れない。ゆえに、氷が外界と接する表面の構造と機能を分子論的に理解する研究が世界中で活発におこなわれている。私たちの生存環境において氷はしばしば水中に存在し、大気中に存在する場合には薄い水膜で覆われている。そのため、水と氷が接する界面の分子レベルでの計測が氷を理解するために不可欠である。しかし氷点温度を厳密に維持しても、相平衡にある水—氷界面の位置は変動する。位置が変動する界面の分子レベル計測、特にAFMによる分子イメージングは困難である。

このような背景のもとで、氷点下に冷却しても凝固しない不凍液(たとえばオクタノール $C_8H_{17}OH$)に氷を浸漬して、液体—氷界面を原子間力顕微鏡(AFM)を使ってイメージングする研究を2021年度からはじめた。湊丈俊主任研究員(分子科学研究所)との共同研究である。2023年度には、 $-10^{\circ}C$ に冷却したオクタノール液体に浸漬した氷をBruker製AFM装置を用いて観察し、高さ0.1 nmのステップ構造を検出した。

【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Photocatalytic Reaction in Aqueous Suspension: FTIR Spectroscopy with Attenuated Total Reflection in Diamonds
Zhebin Fu, Hiroshi Onishi 最終・責任著者 ACS Omega 8(37) 33825- 33830 Sep-23 英語 有 研究論文(学術雑誌)
2. Unravelling the interfacial water structure at the photocatalyst strontium titanate by sum frequency generation spectroscopy
Martin Buessler, Shingo Maruyama, Moritz Zelenka, Hiroshi Onishi, Ellen H.G. Backus Physical Chemistry Chemical Physics 25 31471- 31480 Oct-23 英語 有 研究論文(学術雑誌)

3. Infrared Absorption of Zn_{0.5}Cd_{0.5}S Photocatalyst Bandgap-Excited Under an Aqueous Environment

Yi-Hao Chew, Hiroshi Onishi 最終・責任著者 The Journal of Physical Chemistry C Mar-24 英語 有 研究論文
(学術雑誌)

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. Operando optical spectrometry of semiconductor photocatalysts excited under liquid

Hiroshi Onishi, Zhebin Fu The 19th Korea-Japan Symposium on Catalysis 2023年5月 英語 口頭発表(一般) 国際

2. Infrared Absorption of Metal-Oxide Photocatalysts Excited under Water: Operando Spectroscopy with an ATR Prism

Zhebin Fu, Hiroshi Onishi IUVESTA-ZCAM Workshop: Metal-Oxide Ultrathin Films and Nanostructures: Experiment Meets Theory 2023年7月 英語 ポスター発表 国際

3. Transient Amperometry of O₂ Evolution Reaction on Metal-Oxide Photocatalysts under Water

Hiroshi Onishi IUVESTA-ZCAM Workshop: Metal-Oxide Ultrathin Films and Nanostructures: Experiment Meets Theory 2023年7月 英語 口頭発表(招待) 国際

4. FeCl₃水溶液中におけるSrTiO₃単結晶表面のAFM計測 松井恭平, 大西洋 第132回触媒討論会 2023年9月 日本語 ポスター発表 国内

5. Evaluation of photogenerated charge carriers in transition metal sulfide-based photocatalyst under aqueous environment through attenuated total reflectance FTIR (ATR-FTIR)

Yi Hao Che, Hiroshi Onishi 第132回触媒討論会 2023年9月 英語 口頭発表(一般) 国際

6. タンタル酸ナトリウム光触媒から放出される溶存酸素のマイクロ電極検出: 助触媒の付与による応答の変化 細川大地, 大西洋 第132回触媒討論会 2023年9月 日本語 口頭発表(一般) 国内

7. 半導体光触媒が放出する溶存酸素の時間分解検出 大西洋 第17回分子科学討論会2023大阪 2023年9月 日本語 口頭発表(一般) 国内

8. Adsorption/desorption kinetics at hexadecane/solid interface investigated by fluorescence single molecule observation

Yui Matsushita, Naoki Yamasita, Tomoko Hirayama, Ken-ichi Amano, Takuya Matsumoto, Hiroshi Onishi, Ryugo Tero 2023年日本真空表面科学学術講演会 2023年10月 日本語 口頭発表(一般) 国内

9. AFM characterization of lubricant-TiO₂(110) interfaces Akitsu Sakata, Shiho Moriguchi, Hiroshi Onishi 2023年日本真空表面科学学術講演会 2023年10月 日本語 口頭発表(一般) 国内

10. AFM characterization of ice under organic solvents Ryo Yanagisawa, Tadashi Ueda, Kei-ichi Nakamoto, Hiroshi Onishi, Taketoshi Minato 2023年日本真空表面科学学術講演会 2023年10月 日本語 口頭発表(一般) 国内

11. XAFS Study of Cobalt Oxide Catalysts for Effective Liquid Phase Oxidation Reactions Nobuyuki Ichikuni, Junhao Wang, Tomoko Yoshida, Hiroshi Onishi, Takayoshi Hara UVSOR-III + MAX IV International Workshop: Frontier of Soft X-ray Spectroscopy for Chemical Processes in Solutions 2023年10月 英語 ポスター発表 国際

12. Soft x-ray spectroscopy for semiconductor photocatalysts Hiroshi Onishi UVSOR-III + MAX IV International Workshop: Frontier of Soft X-ray Spectroscopy for Chemical Processes in Solutions 2023年10月 英語 口頭発表(招待) 国際

13. 蛍光一分子観察法の固体-有機溶媒界面への応用 松下結依, 手老龍吾, 山下直輝, 平山朋子, 天野健一, 松本拓也, 大西洋 第54回中部化学関係学協会支部連合秋季大会 2023年11月 日本語 口頭発表(一般) 国内

14. AFM Characterization of Ice Films Immersed in Organic Solvents Ryo Yanagisawa,Tadashi Ueda,Kei-ichi Nakamoto,Hiroshi Onishi,Taketoshi Minato 31st International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM31) 2023年12月 日本語 ポスター発表 国際
15. Atomic force microscopy in organic solvents Hiroshi Onishi Seminar in Peking University 2024年1月 英語 口頭発表(招待) 国際
16. Artificial Photosynthesis Driven by Polarons Photoexcited in Semiconductor Photocatalysts Hiroshi Onishi Surface Science Colloquium in Chinese Academy of Science 2024年1月 英語 口頭発表(招待) 国際
17. FeCl₃水溶液中におけるSrTiO₃光触媒基板の光腐食のAFM計測 松井恭平,大西洋 日本化学会第104春季年会 2024年3月 日本語 口頭発表(一般) 国内

【受賞】※下記の順で記載

賞名称 受賞者 受賞対象 授与機関名 受賞区分 受賞年月 国内国外区分

1. 令和5年度神戸大学学長表彰(財務貢献者) 大西 洋 神戸大学 2023年10月

[4] 木村 建次郎

研究項目:散乱理論・散乱イメージング理論の構築

散乱場理論においては、送信点、受信点は無指向性の素子を前提としている。レーダでは一つのアンテナが複数のアンテナ素子から構成されていてそれらが本質的に同位相で動作するようになっている。フェーズドアレイも本質的には位相を揃えている。こうすることで開口面を大きくし、指向性を向上させるように設計されている。このような指向性と散乱場理論を両立させることが可能となれば実用上、非常に価値がある。散乱場理論における散乱場関数を用いると、この両立を実現することができる。本研究では、最も基本的な送信点と受信点の構成を基にした2次元配逆散乱理論—境界が平面の場合—を例に取り上げ、指向性と散乱場理論を両立させることを試みた。アンテナのサイズは通常使用する電磁波の波長に比べて十分大きいとし、簡単化のためにアンテナの形状を長方形と定めた。この有限サイズアンテナで測定した観測結果を用いて、指向性を考慮した散乱場の式を導出することに成功した。

【MISC】※下記の順で記載

タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. マイクロ波マンモグラフィの開発と臨床研究 稲垣明里,平井綾華,中島義晴,弓井孝佳,木村憲明,木村建次郎 日本放射線技術学会 79(1) 84- 89 Jul-05 日本語 無 記事・総説・解説・論説等(学術雑誌)
2. 透視の科学—逆問題の解析解が電池を透視, 寿命を予言 木村建次郎,松田聖樹,鈴木章吾,木村憲明 科学 岩波 94(3) 254- 257 Jul-05 日本語 無

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. 多重経路散乱場理論の開発とマイクロ波マンモグラフィへの応用 木村建次郎 IMIColloquium 2023年4月 日本語 口頭発表(招待) Web上での発表 国内

2. 明るい未来を創る革新者たち 木村建次郎 明るい未来を創る革新者たち 2023 年 4 月 日本語 口頭発表(招待) パレスホテル東京4階「山吹」 国内
3. 京都大学特殊講義ーベンチャー・エコシステム 木村建次郎,岡橋寛明 京都大学特殊講義ーベンチャー・エコシステム 2023 年 5 月 日本語 口頭発表(招待) 京都大学 国内
4. "38 億人を救う数式" 木村建次郎,岡田英朗,平井綾華 特別講義 2023 年 6 月 日本語 口頭発表(招待) 兵庫県立長田高等学校 国内
5. "蓄電池内部電流密度分布映像化技術の開発" 木村建次郎 第 45 回 R&D エグゼクティブ交流会 2023 年 7 月 日本語 口頭発表(招待) ホテルグランヴィア京都 国内
6. 波動散乱逆問題とマイクロ波マンモグラフィ 木村建次郎 第 483 回光産業技術マンスリーセミナー 2023 年 8 月 日本語 口頭発表(招待) Web 上での発表 国内
7. 弾性波動散乱場断層映像化技術の開発 薮本海,弓井孝佳,木村憲明,木村建次郎 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会 2023 年 9 月 日本語 口頭発表(一般) ハイブリッド(熊本城ホール) 国内
8. 磁場逆解析に基づく鉄筋腐食 破断非破壊映像化装置の開発 岡田英明,松田聖樹,鈴木章吾,弓井孝佳,木村憲明,木村建次郎 第 84 回 応用物理学会 秋季学術講演会 2023 年 9 月 日本語 口頭発表(一般) ハイブリッド(熊本城ホール) 国内
9. 超音波を用いた散乱場断層イメージング技術の開発 薮本海,弓井孝佳,木村憲明,木村建次郎 非破壊検査協会 秋季講演会 2023 年 10 月 日本語 口頭発表(一般) あわぎんホール 国内
10. Development of electric current density imaging inside lithium-ion battery S. Suzuki,S. Matsuda,Y. Nishimura,H. Okada,N. Kimura,K. Kimura THE KOREAN ELECTRO CHEMICAL SOCIETY (한국전기화학회) 2023 年 11 月 英語 口頭発表(一般) 麗水エキスポコンベンションセンター 国際
11. みえない世界をみる理論 木村建次郎 創立記念講演会 2023 年 11 月 日本語 口頭発表(招待) 岡山高校 国内
12. マイクロ波マンモグラフィ原理に基づいた使用法に関する検討 平井綾華,出口雄一,薮本海,稲垣明里,木村建次郎,高尾信太郎,廣利浩一,金昇晋,山神和彦,岡本交二,國久智成,谷野裕一,弓井孝佳,中島義晴,木村憲明 第 33 回日本乳癌検診学会学術総会 2023 年 11 月 日本語 口頭発表(一般) 福岡国際会議場 国内
13. 電流密度分布映像化システムによる蓄電池評価と劣化挙動との相関 松田聖樹,鈴木章吾,西村祐太郎,岡田英朗,木村憲明,木村建次郎 第 64 回電池討論会 2023 年 11 月 日本語 口頭発表(一般) 大阪府立国際会議場グランキューブ大阪 国内
14. 「みる」ことの普遍的な数理 木村建次郎 JST さきがけ「ナノシステムと機能創発」領域 第 1 回ナノシステム研究会 2023 年 12 月 日本語 口頭発表(一般) 島津製作所本社 国内
15. トンネル磁気効果素子を用いたコンクリート内部鉄筋腐食・破断映像化装置の開発 木村建次郎,岡田英朗,松田聖樹,鈴木章吾,弓井孝佳,木村憲明 建設技術研究開発助成制度成果報告会 2023 年 12 月 日本語 口頭発表(一般) 中央合同庁舎 2 号館 国内
16. 散乱理論・散乱イメージング理論の構築 木村建次郎 学術変革領域「散乱・揺らぎ場の包括的理解と透視の科学」第 6 回領域会議 2023 年 12 月 日本語 口頭発表(一般) レクトーレ湯河原 国内
17. 透視の理論と方法ーみえないものを見るー 木村建次郎 第 515 回生存圏シンポジウム 生存圏ミッションシンポジウム 2024 年 2 月 日本語 口頭発表(一般) 京都大学きはだホール 国内
18. 透視の理論と方法ーみえないものを見るー 木村建次郎 透視の理論と方法ーみえないものを見るー 2024 年 3 月 日本語 口頭発表(一般) 島根大学 本部棟 5 階大会議室 国内

【受賞】※下記の順で記載

賞名称 受賞者 受賞対象 授与機関名 受賞区分 受賞年月 国内国外区分

1. 令和5年度学長表彰 木村建次郎 神戸大学 2023年10月

【5】枝 和男

課題:物質創製と新機能性物質合成法の開発

研究活動まとめ

1) 新規イソポリオキソタングステートの開発

近年、メタタングステートとして知られる Keggin 型の閉殻骨格の内部に2つのプロトンを含むイソポリオキソタングステートの還元体が、水素酸化触媒としての白金に匹敵する触媒能を持つことが示され、その骨格内部の狭い空間に閉じ込められたプロトンが示す特異な性質に興味を持たれている。最近、われわれの研究室では、第一原計算により4つのプロトンが骨格内部に取り込まれた新規の Keggin 型イソポリオキソタングステート生成の可能性を明らかにした。この新規の Keggin 型イソポリオキソタングステートの単離法の確立とその物質の物性評価を目指して取り組んだ。様々な条件で調製法を検討したが、この物質は非常に複雑な対カチオン分子のディスオーダーを示す単結晶としてしか単離することはできなかった。その結晶の構造解析は非常に難解であったが、引き残しの電子密度を参考に対カチオン分子の配置を考えることによって空間群 $I_{\bar{4}3m}$ でのラセミ双晶モデルでその構造解を得ることに成功した。

2) 新規 Keggin 型イソポリオキソモリブデートの開発

1) で述べたようにポリオキソメタレート骨格内部の狭い空間に閉じ込められたプロトンが示す特異な性質に興味を持たれている。2つのプロトンを含む Keggin 型イソポリオキソタングステートであるメタタングステートはよく知られており、工業的にも生産・利用される。一方、骨格内部にプロトンを含む Keggin 型イソポリオキソモリブデートはほとんど知られておらず、関連する種としては Zhao らが2016年に報告した複塩中の Keggin 型イソポリオキソモリブデートであるが、それがもつプロトンが骨格表面に付加されたものであるのか、骨格内部にあるのかは特定されていない。そのため、第一原理計算によりこれらの種の構造安定性を調べ、プロトンが酸化物骨格内部に取り込まれた Keggin 型イソポリオキソモリブデートの生成の可能性について検討した。その結果、骨格内部にプロトンを含む Keggin 型イソポリオキソモリブデートの生成の可能性と何故一般的にそのようなイソポリオキソモリブデートの存在が知られていないのかの理由に繋がる知見を得ることができた。

3) 新規 Keggin 型ヘテロポリオキソモリブデートの開発

Anderson 型ポリオキソメタレートは多電子移動触媒として期待される Keggin 型ポリオキソメタレートを形成する為の前駆体物質となる。これまで我々の研究室では新規 Keggin 型ヘテロポリオキソメタレートの開発を目指して、Anderson 型ヘテロポリオキソタングステートから Keggin 型ヘテロポリオキソタングステートの反応について研究を行ってきたが、ヘテロポリオキソメタレートにはモリブデートも存在する。一般的にオルト酸である MO₆ メタレートユニットの構造は、 $M=W$ の場合1つの酸素が二重結合的となる(monooxo 型)構造を好むのに対し、 $M=Mo$ では2つの酸素が二重結合的となる(dioxo 型)構造を好む。新規 Keggin 型ヘテロポリオキソモリブデートの開発を考える場合、このような性質が Anderson 型ポリオキソメタレートの構造とその安定性、そして結果とし

て Keggin 型 ポリオキシソメタレート の調製条件などに及ぼすことが考えられる。したがって、この影響について明らかにするため第一原理計算を用いて調べた。その結果、ポリオキシソモリブデートはやはり dioxo 構造を好むとことは確かめられたが、タングステートとモリブデートの違いが、ヘテロ原子の違いによる Anderson 型ポリオキシソメタレートの構造とその安定性の傾向に及ぼす影響はそれほど大きくないことがわかった。

4) 共同研究

学内外を問わず様々な研究者と共同研究を進め、単結晶試料の構造情報の提供を行った。

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. 拡張型ポリオキシタングステートの生成経路についての研究 窪田 樹,大塚 利行,中嶋 隆人,枝 和男 日本コンピュータ化学会 2023 年春季年会 2023 年 6 月 日本語 ポスター発表 東京工業大学 国内
2. 新規の α -Keggin 型イソポリタングステートの研究 齋藤真輝,枝 和男,堀田弘樹,大塚利行,松本健嗣 第 69 回ポーラグラフィーおよび電気分析化学討論会 2023 年 10 月 日本語 ポスター発表 福江文化会館 国内

1-3. 反応物理化学

【 6 】 小堀 康博

課題 1: 金属有機構造体(MOF)の一重項分裂による量子コヒーレンス効果の解析

外部磁場存在下で反応中間体の磁気的性質をマイクロ波により検出する時間分解電子スピン共鳴法を用い、MOF において生成する三重項励起子対を高温条件にて観測した。ペンタセン誘導体による結晶性、および非晶性をもつ固体薄膜基板をスピコート法によって作成し、この試料に対しパルスレーザー光を照射した。これにより生成した強相関励起子対と解離三重項励起子によるマイクロ波の吸収(A)および放出(E)の信号を 100 ナノ秒の精度で検出した。このマイクロ波遷移の信号を量子論に基づき解析するための手法として、弱く相関した三重項対に対する「電子スピン分極移動モデル」を用いた。各解離三重項励起子のスピン間相互作用により弱い相関をしめす励起子対に対し、量子重ね合わせによるスピン波動関数を表した。強相関励起子対の一重項および五重項量子もつれの転送による 9 つの量子重ね合わせ状態への状態分布と量子エネルギー準位から、量子状態間に起こる 16 本のマイクロ波遷移を表し電子スピン共鳴スペクトルを解析した。この結果、得られたマイクロ波の吸収(A)と放出(E)による信号パターンが説明され、量子テレポーテーション効果が実証された。この系に対する温度効果の観測により、励起子解離に対する活性化パラメータの決定を行ったところ、熱活性化状態からの励起子解離に対する電子的相互作用が、熱活性化に対する電子的相互作用よりも大きいことがわかった。さらに、一重項励起子分裂による多重励起子生成で得られる四電子スピン量子ビット系を利用する、量子演算系の構築を目指し、導入したパルス EPR 法で照射するパルスマイクロ波を用いた制御を試みた。ペンタセンダイマーなど、種々の連結化合物で励起五重項状態や、解離 T+T 状態においてパルスマイクロ波による量子コヒーレンスの制御に成功した。室温で、励起五重項に対する量子コヒーレンスが観測され、構造体特有の制限を受けたフォノン効果による構造ゆらぎが関与していることが明らかになった。また、スピンの運動について分子配向変化も考慮した量子シミュレーションにより測定結果を再現したところ、色素部位の運動性が抑制され、色素同士の配向の変化が小さい MOF の骨格格子振動が五重項状態の生成と量子コヒーレンスの保持に寄与していることがわかった。

課題 2: 分子内一重項分裂と分子内三重項消滅に対する分子内振動効果の解明

フェニレンユニットで連結させたペンタセンダイマーなど、種々の連結化合物の一重項分裂で生成する励起五重項状態の観測を時間分解電子スピン共鳴法により行っている。置換位置に依存する一重項分裂速度の相違に関わる電子的相互作用を特徴づけると共に、運動効果を露わに考慮した量子論モデルを新たに構築し、五重項立体配置を明らかにし五重項生成機構と五重項励起子解離による三重項対生成機構を明らかにした。さらに、過渡吸収法と時間分解 EPR 法の両方で温度効果の詳細な解析を行った結果、低温領域での解離に対する熱活性化には、固体材料の分子間相互作用によるフォノン効果が役割を果たすことが実証された。また、励起子ペアの三重項性が三重項消滅を起こし、単一三重項励起子を生成させることも明らかになった。

課題 3: 非フラーレン型太陽電池材料の界面電荷分離構造解析

チオフェン系 π 共役オリゴマーに電子受容性を付与したアクセプター分子の立体構造とエネルギー変換効率の関係性を明らかにするために、非フラーレンアクセプター ITIC および、Y6 や、京都大学の今堀グループが開発した高効率なアクセプター分子に注目した。ベンゾジチオフェン構造を有するポリマー(PBDB-T)をドナーとする混合膜の時間分解電子スピン(TREPR)共鳴を観測し、電荷分離状態の構造解析を行った。スピン相関ラジカル対モデルによる解析により電荷分離構造解析を行い、3-7 nm の超長距離電荷分離を 80 K で示すことが明らかとなった。また、パルス EPR 法による電子スピンエコー包絡線変調(ESEEM)を観測すると、バルクヘテロ基板と二層膜基板による面外方向と外部磁場とのなす角によって変化することから、この長距離電荷分離状態は、ドナー:アクセプター界面に誘起するバイアスポテンシャルの影響を持つことがわかった。

課題 4: らせん構造を有する部分埋込型ジヒドロピリダジンの光異性化反応

電子スピン共鳴法により、「部分的に埋め込まれた縮環ジヒドロピリダジン N-アリアルアザ[5]ヘリセン誘導体」(PDH)と、ケクレラジカル構造に基づく固有の光トリガー多機能特性の実証を行った。アザ[5]ヘリセン骨格(PDH-CF₃ および-C₂F₅)に嵩高い電子吸引力トリフルオロメチル基またはペンタフルオロエチル基を導入すると、室温でも P 型と M 型のヘリシティに基づく PDH の軸性キラリティが得られる。凍結溶液中の PDH-CF₃ に光照射したところ、N-N 結合の解離によって生じたゼロ磁場分裂値を持つ三重項ビラジカルからの ESR シグナルが観測された。このことは、ケクレ構造に基づくビラジカル型とキノイド型、及び N-N 結合の解離と再結合の 2 つの平衡が存在することを示している。観察された光誘起および熱誘起の挙動は、T 型フォトクロミック分子が、この 2 つの平衡が関与する光異性化機構に関与していることを示している。この光異性化にヒントを得て、光ラセミ化による PDH のキラリティ制御が達成された。T 型フォトクロミズム、光励起を介した三重項ビラジカルの形成、光ラセミ化など、「部分的に埋め込まれたジヒドロピリダジン」構造に起因する複数の機能性が示された。

課題 5: 有機発光素子による熱活性化遅延蛍光に対する動的機構の解明

有機発光素子として開発されている芳香族連結分子系に対して、時間分解電子スピン共鳴分光法による励起三重項状態の観測を行った。一重項-三重項励起子項間交差過程と逆項間交差(RISC)過程の異方性を特徴づけることにより、生成された励起三重項状態の電子密度分布と分子内面外非対称振動による逆項間交差過程の高速化が示唆された。9,9-dimethyl-9,10-dihydroacridine - adamantyl substituted 2-phenyl-1,3,5-triazine 連結分子(MA-TA)に対し、時間分解 EPR 法による計測を行った。三重項励起子や励起子ペアなどスピン多重度が高いスピン量子系は、複数スピン間の相互作用としてゼロ磁場分裂相互作用を持つ。このゼロ磁場分裂テンソルは、外部磁場に対する分子配向の影響(異方性)を有するばかりでなく、分子の配向運動による動的効果に

起因し異方性に対する平均化の影響も受ける。我々はこの効果を利用した時間分解 EPR スペクトルの線形解析を行った。その結果、1) 励起子立体配置の低周波変調によるスピン軌道相互作用の増強と、2) 熱活性化遅延蛍光に至る T_1 - S_1 エネルギー交差のスピン副準位ダイナミクスを明らかにした。

課題 6: 三重項-三重項消滅による光アップコンバージョン機構の解明

有機太陽電池やオプトエレクトロニクスにおいて、一重項状態へのスピン変換過程を操作することにより、効率的な三重項-三重項消滅 (TTA) を実現し、光-エネルギー変換効率を向上させた固体材料の開発が期待されている。本研究では、TTA による遅延蛍光のスピン変換機構を分子構造の微視的な観点から解明する。高効率アップコンバージョン発光を示すアモルファス固体系において、三重項対状態 (TT 状態) の電子スピン偏極の時間発展を時間分解電子常磁性共鳴法を用いて調べた。その結果、一重項三重項状態のスピン状態ポピュレーションが、三重項三重項状態と五重項三重項状態の間のランダムな配向ダイナミクスによる交換相互作用の変調を伴う励起子拡散中のスピン相互変換によって増加し、アップコンバージョン発光の高い量子収率を達成することを明らかにした。この理解は、TTA を利用した効率的な光-エネルギー変換デバイスの開発への指針を与えた。

課題 7: フェロセン架橋ペンタセン二量体の分子内一重項分裂による五重項多重励起子形成におけるねじれ運動の効果

一連のフェロセン (Fc) 架橋ペンタセン (Pc) ダイマー $[Fc-Ph(2,n)-(Pc)_2]$: n =フェニレンスペーサーの数] を合成し、分子内一重項分裂 (ISF) による強結合五重項マルチエキシトン (5TT) 形成に対する Fc 末端フェニレンリンカーのねじれ運動効果を調べた。Fc-Ph(2,4)-(Pc)₂ は、分光学的及び理論的解析によれば、比較的小さな電子的結合と大きな立体配座の柔軟性を持つ。Fc-Ph(2,4)-(Pc)₂ は、ISF による定量的な一重項 TT (1TT) 生成とともに、高収率の 5TT を示す。これは、他の柔軟性の低い Pc 二量体よりもはるかに効率的な ISF であることを示している。Fc-Ph(2,4)-(Pc)₂ の 1TT スピン変換における活性化エントロピーは、リンカーのねじれ運動に伴うコンフォメーションの柔軟性が大きいこと、他の系よりも大きい。1TT におけるリンカーのねじれ運動は、1TT の不對軌道において Pc の正孔準位が Fc にハイブリダイゼーションすることにより、Fc の金属-リガンド結合が弱まることに起因する。

【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻 (号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Biomimetic design of an α -ketoacylphosphonium-based light-activated oxygenation auxiliary.

Ryoto Oya, Kenji Ota, Masaaki Fuki, Yasuhiro Kobori, Masahiro Higashi, Kazunori Nagao, Hirohisa Ohmiya

Chemical science 14(38) 10488- 10493 Oct-23 英語 有 研究論文 (学術雑誌)

2. Photoisomerization of "Partially Embedded Dihydropyridazine" with a Helical Structure. Kazuteru Usui, Ami

Amano, Kasumi Murayama, Miho Sasaya, Ryota Kusumoto, Tomohiro Umeno, Satsuki Murase, Naoko Iizuka, Shota

Matsumoto, Yasufumi Fuchi, Kazuyuki Takahashi, Masatoshi Kawahata, Yasuhiro Kobori, Satoru Karasawa 責任著者

Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany) 29(62) Nov-23 英語 有 研究論文 (学術雑誌)

3. The Effect of Torsional Motion on the Quintet Multiexciton Formation through Intramolecular Singlet Fission in

Ferrocene-Bridged Pentacene Dimers. Ryo Hayasaka, Hayato Sakai, Masaaki Fuki, Tsubasa Okamoto, Ramsha

Khan, Masahiro Higashi, Nikolai V Tkachenko, Yasuhiro Kobori, Taku Hasobe 責任著者 Angewandte Chemie

(International ed. in English) 63(8) Jan-24 英語 有 研究論文 (学術雑誌)

4. Room-temperature quantum coherence of entangled multiexcitons in a metal-organic framework.

Akio Yamauchi, Kentaro Tanaka, Masaaki Fuki, Saiya Fujiwara, Nobuo Kimizuka, Tomohiro Ryu, Masaki Saigo, Ken Onda, Ryota Kusumoto, Nami Ueno, Harumi Sato, Yasuhiro Kobori, Kiyoshi Miyata, Nobuhiro Yanai 責任著者 Science advances 10(1) Jan-24 英語 有 研究論文(学術雑誌)

5. Efficient Spin Interconversion by Molecular Conformation Dynamics of a Triplet Pair for Photon Up-Conversion in an Amorphous Solid Tsubasa Okamoto, Seiichiro Izawa, Masahiro Hiramoto, Yasuhiro Kobori 最終・責任著者 The Journal of Physical Chemistry Letters 15(11) 2966- 2975 Mar-24 英語 有 研究論文(学術雑誌)

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. Non-Polymer Organic Solar Cells: Microscopic Phonon Control to Suppress Non-Radiative Voltage Loss via Charge-Separated State Yasuhiro Kobori ECS Meeting 2023 年 5 月 英語 口頭発表(招待) カリフォルニア州 国際
2. 有機薄膜太陽電池における電荷輸送機構への非フラーレンアクセプターの立体構造の効果
村山加純, 小堀康博 高知化学シンポジウム 2023 2023 年 7 月 日本語 ポスター発表 高知工科大学 国内
3. 分子内一重項励起子分裂で生成する三重項励起子対の構造変化と三重項消滅 時間分解 EPR と過渡吸収による解析 楠本遼太, 羽曾部卓, 小堀康博 高知化学シンポジウム 2023 2023 年 7 月 日本語 ポスター発表 高知工科大学 国内
4. Impact of Non-fullerene Acceptor Steric Structure on Photoinduced Charge-Separation in Bulkheterojunction Film Studied by Time-resolved EPR Kasumi Murayama, Yasuhiro Kobori The 31st International Conference on Photochemistry 2023 年 7 月 英語 ポスター発表 SAPPORO PARK HOTEL 国際
5. Time-Resolved EPR Study on Conformational Changes in Triplet-Triplet Dissociation and Annihilation after Intramolecular Singlet Fission Ryota Kusumoto, Taku Hasobe, Yasuhiro Kobori The 31st International Conference on Photochemistry 2023 年 7 月 英語 ポスター発表 SAPPORO PARK HOTEL 国際
6. Time-resolved EPR study of electron spin polarization in an efficient triplet-triplet annihilation upconversion system Tsubasa OKAMOTO, Yasuhiro Kobori The 31st International Conference on Photochemistry 2023 年 7 月 英語 ポスター発表 SAPPORO PARK HOTEL 国際
7. Key conformation dynamics for light-induced energy conversions: Transient EPR study Yasuhiro Kobori The 31st International Conference on Photochemistry 2023 年 7 月 英語 口頭発表(招待) SAPPORO PARK HOTEL 国際
8. 光エネルギー変換への鍵となる分子配向と低周波振動: 時間分解 EPR による観測
小堀康博 2023 年光化学討論会 2023 年 9 月 日本語 口頭発表(招待) 広島国際会議場 国内
9. Observation of photon upconversion by triplet-triplet annihilation using time-resolved EPR: Contribution of intramolecular triplet exciton rotation 東晃輔, 小堀康博 2023 年光化学討論会 2023 年 9 月 英語 ポスター発表 広島国際会議場 国内
10. Elucidation of Initial Charge Separation Structure in ITIC-Based Organic Thin Film Solar Cell Studied by Time-Resolved EPR 辻村颯太, 小堀康博 2023 年光化学討論会 2023 年 9 月 英語 ポスター発表 広島国際会議場 国内
11. 三重項一三重項消滅を用いた液体光アップコンバータに生成する電子スピン分極の時間発展
岡本翔, 小堀康博 2023 年光化学討論会 2023 年 9 月 日本語 口頭発表(一般) 広島国際会議場 国内
12. フェロセンで連結したペンタセンダイマーにおける一重項分裂で生成する三重項励起子
婦木正明, 小堀康博 2023 年光化学討論会 2023 年 9 月 日本語 ポスター発表 広島国際会議場 国内

13. 分子内一重項励起子分裂に伴う構造変化と三重項消滅: 時間分解 EPR と過渡吸収による解析 楠本遼太, 羽曾部卓, 小堀康博 第 17 回分子科学討論会 2023 2023 年 9 月 日本語 口頭発表(一般) 大阪大学 国内
14. Photoinduced spin entanglement and decoherence in functionality of complex molecular systems Yasuhiro Kobori 第 73 回錯体化学討論会 2023 年 9 月 英語 口頭発表(招待) 水戸市民会館 国内
15. 三重項一三重項消滅を用いた光アップコンバージョンの時間分解 EPR 法による観測: 分子内三重項励起子ホッピングの寄与 東晃輔, 小堀康博 第 62 回電子スピンサイエンス学会年会 2023 年 11 月 日本語 ポスター発表 神戸大学 国内
16. 非フラーレン型アクセプターを用いた有機薄膜太陽電池光活性層の初期電荷分離構造: 時間分解 EPR 法による解析 辻村颯太, 小堀康博 第 62 回電子スピンサイエンス学会年会 2023 年 11 月 日本語 ポスター発表 神戸大学 国内
17. 三重項-三重項消滅型光アップコンバータにおける励起子ダイナミクスの時間分解 EPR による解析 岡本翔, 小堀康博 第 62 回電子スピンサイエンス学会年会 2023 年 11 月 日本語 口頭発表(一般) 神戸大学 国内
18. フェロセンで連結したペンタセンダイマーにおける一重項分裂で生成する多重励起子 婦木正明, 小堀康博 第 62 回電子スピンサイエンス学会年会 2023 年 11 月 日本語 ポスター発表 神戸大学 国内
19. 熱活性化遅延蛍光に至る薄膜中三重項励起子の低振動運動: 時間分解 EPR による観測 小堀康博 第 62 回電子スピンサイエンス学会 2023 年 11 月 日本語 口頭発表(一般) 神戸大学 国内
20. Spin-state dynamics and anisotropies in organic solar cells using transient EPR Yasuhiro Kobori The 8th International Symposium on Dynamic Exciton 2023 年 11 月 英語 口頭発表(招待) 国際
21. Molecular conformation dynamics effect in singlet-fissions Yasuhiro Kobori The 9th International Symposium on Dynamic Exciton 2023 年 11 月 英語 口頭発表(招待) 国際
22. 時間分解電子スピン共鳴法とパルス電子スピン共鳴法による非フラーレン型有機薄膜太陽電池の界面電荷分離状態の解析 村山加純, 小堀康博 日本化学会第 104 春季年会(2024) 2024 年 3 月 日本語 口頭発表(一般) 日本大学 国内
23. パルス EPR 法によるスピン相関三重項対のスピン量子コヒーレンス観測 小堀康博, 婦木正明, 羽曾部卓 日本化学会第 104 春季年会(2024) 2024 年 3 月 日本語 口頭発表(一般) 日本大学 国内
24. ゆらぎによる励起子ペアのスピン偏極 小堀康博 第 2 回 DNP 研究会 2024 年 3 月 日本語 口頭発表(招待) 大阪大学 国内
25. Spin conversion mechanism for efficient photon up-conversion in amorphous rubrene Tsubasa OKAMOTO, Yasuhiro Kobori 9th Kanto Spin Chemistry Meeting 2024 年 3 月 英語 口頭発表(一般) 神奈川大学 国内
26. Quantum decoherence in triplet-radical linked system Yasuhiro Kobori 9th Kanto Spin Chemistry Meeting 2024 年 3 月 英語 口頭発表(一般) 神奈川大学 国内

【書籍等】※下記の順で記載

タイトル 担当区分 著者名 出版社・発行元 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. 量子生命科学ハンドブック (瀬藤; 光利; 荒牧, 修平) 分担執筆 小堀康博 エヌ・ティー・エス Mar-24 英語 有
教科書・概説・概論

【受賞】※下記の順で記載

賞名称 受賞者 受賞対象 授与機関名 受賞区分 受賞年月 国内国外区分

1. 米国化学会 The Journal of Physical Chemistry Letters ポスター賞 楠本遼太・小堀 G

【 7 】 立川 貴士

課題 1: ナノ粒子の高次構造制御による高効率光エネルギー変換系の創製

光触媒作用による太陽光水分解は、化石燃料に頼らないクリーンな水素エネルギーや有用化成品の製造法として注目を集めている。本研究では、従来、過酸化水素の生成には適していなかったヘマタイトの表面をチタンとスズを含む複合酸化物で被覆することで、水素と過酸化水素を極めて高い効率と選択性で生成できることを見出してきた。当該年度は、ドーパントの種類および濃度がヘマタイト光電極の特性に及ぼす影響を定量化することを主たる目的とし、新規光電極の作製と光電気化学的評価を行った。合成条件のうち、ヘマタイト電極作製時の冷却過程とその後の低温アニールが、ヘマタイト光電極性能に大きく関与することがわかった。同じ触媒かつ同じ作製法で得られた電極にも関わらず、性能にばらつきがあるヘマタイト光電極について、低温アニール処理を行うことで性能の向上と均一化を達成できた。最適化された作製プロセスで得られた光電極の光触媒活性を予測するため、機械学習モデルの作成を行った。光触媒活性の定量は、光電極に疑似太陽光を照射し、リニアスウィープボルタンメトリーによって評価した。説明変数は、蛍光 X 線測定によって決定した組成式から XenonPy を用いて作成した元素特徴量を用いた。ランダムフォレスト回帰による触媒活性予測から、分散の値を用いることで決定係数の増加や、平均二乗事情誤差や平均絶対誤差の減少がみられた。これは、予測モデルの表現力が向上したためと考えられる。上記に加え、光触媒システムの性能および応用範囲を向上・拡大するため、異種材料との複合化や関連する光機能性材料の特性評価を行った。

再生可能エネルギーを駆動力とし、プラスチックや CO₂ などの廃棄物を水素燃料や有用化成品に変換できるバイオ・光触媒は、グリーンな炭素循環システムを実現する上で中心的な役割を果たすと期待されている。例えば、ポリエチレンテレフタレート (PET) を酵素反応によって分解し、エチレングリコールやテレフタル酸を生成する細菌が注目されている。これらの分解物を基にグリーンな水素を製造することができれば資源循環型社会の実現につながると期待される。本年度は、当グループで開発したヘマタイトメソ結晶光電極を用いたエチレングリコールの酸化反応を電気化学測定によって観測し、その高効率・高選択的酸化に寄与する光触媒構造について検討した。

課題 2 光機能性材料の合成と単一粒子発光観測

CH₃NH₃PbI₃ に代表される有機無機ペロブスカイトは次世代の太陽電池や発光デバイスへの応用が期待されている。これらのペロブスカイトには、水と接触することによって容易に分解してしまうという課題があったが、近年、水溶液系においてペロブスカイトが分解せず、安定に存在することが示された。この条件下ではペロブスカイトは水素生成光触媒としてはたらくが、その基礎的理解は進んでいない。そこで本研究では、単一粒子蛍光顕微鏡を用いた発光観測から、水溶液中における CH₃NH₃PbBr_xI_{3-x} ナノ粒子の電荷キャリアダイナミクスの解明に取り組んだ。CH₃NH₃PbBr₃ が析出した飽和水溶液に、CH₃NH₃PbI₃ の飽和水溶液を混合し、混合溶液を加熱することでハロゲン混合型ペロブスカイト (CH₃NH₃PbBr_xI_{3-x}) の過飽和溶液を調製した。この過飽和溶液の冷却に伴って水溶液中に析出する MAPbBr_{2.6}I_{0.4} 結晶の発光特性を、蛍光顕微鏡を用いて評価した。MAPbBr_{2.6}I_{0.4} への 405 nm パルスレーザー照射に伴って、発光波長が長波長側へとシフトした。これは、ペロブスカイト結晶中のハロゲン分布が光照射によって変化する相分離が進行した結果である。また、レーザーの位置選択的な照射

により、臭素リッチ領域とヨウ素リッチ領域を空間的に分離することができた。動的平衡状態にあるペロブスカイト結晶の過渡的な構造・組成変化を単一粒子レベルでその場観測することに成功したといえる。

特定の刺激に応答し、構造・物性・反応性を瞬時に変化させる光機能性材料が近年注目されている。一方、これらの多様かつ複雑な振る舞いを支配しているメカニズムに関しては理解が十分に進んでいない。刺激を受けることによって分子・結晶構造の変化が時々刻々と起こり、同時に、発光波長や寿命などの発光特性や反応性の変化が誘起される。構造と発光特性の相関性を実験的に捉えることため、本研究では、単一粒子レベルの発光観測から、機械的刺激や酸への曝露によって引き起こされる蛍光特性変化のメカニズムを明らかにした。

【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Charge Trapping in Semiconductor Photocatalysts: A Time- and Space-Domain Perspective

Jiawei Xue, Mamoru Fujitsuka, Takashi Tachikawa, Jun Bao, Tetsuro Majima Journal of the American Chemical Society 146(13) 8787- 8799 Mar-24 英語 有 研究論文(学術雑誌)

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. 高選択的光過酸化水素生成に向けたヘマタイトメソ結晶光触媒の局所構造解析 西村 拓真, 隈部 佳孝, 立川 貴士 第44回 光化学若手の会 2023年6月 日本語 ポスター発表 いこいの宿淡路島 津名ハイツ 国内

2. 水溶液系ペロブスカイトナノ粒子の単一粒子発光イメージング 竹内 愛斗, 隈部 佳孝, 立川 貴士 第44回 光化学若手の会 2023年6月 日本語 ポスター発表 いこいの宿淡路島 津名ハイツ 国内

3. 水中におけるスズ系有機無機ペロブスカイトの発光観測 田中 直純, 隈部 佳孝, 立川 貴士 第44回 光化学若手の会 2023年6月 日本語 ポスター発表 いこいの宿淡路島 津名ハイツ 国内

4. 高選択的光過酸化水素生成に向けた異種金属ドーパヘマタイトメソ結晶の局所構造解析 西村 拓真, 隈部 佳孝, 立川 貴士 高知化学シンポジウム 2023 2023年7月 日本語 ポスター発表 高知工科大学 永国寺キャンパス 国内

5. ペロブスカイト光触媒における界面電荷移動速度と水素生成活性の相関 竹内 愛斗, 隈部 佳孝, 立川 貴士 高知化学シンポジウム 2023 2023年7月 日本語 ポスター発表 高知工科大学 永国寺キャンパス 国内

6. 高効率光水素製造を目指した SrTiO₃/TiO₂ 光触媒の開発 劉 詩宇, 隈部 佳孝, 立川 貴士 高知化学シンポジウム 2023 2023年7月 日本語 ポスター発表 高知工科大学 永国寺キャンパス 国内

7. プラスチック分解物の高効率・高選択的酸化に寄与する光触媒システムの構築 村尾 智央, 隈部 佳孝, 立川 貴士 高知化学シンポジウム 2023 2023年7月 日本語 ポスター発表 高知工科大学 永国寺キャンパス 国内

8. 水中における DMASnI₃ の発光挙動 田中 直純, 隈部 佳孝, 立川 貴士 高知化学シンポジウム 2023 2023年7月 日本語 ポスター発表 高知工科大学 永国寺キャンパス 国内

9. Nanoscopic structure - property relationships of organolead halide perovskites Takashi Tachikawa, Izuru Karimata, Satoshi Tominaka, Takahide Matsuoka, Moeri Sakamoto, Takahito Nakajima The 31st International Conference on Photochemistry 2023年7月 英語 ポスター発表 Sapporo Park Hotel, Sapporo, Japan 国際

10. Fluctuated charge transfer of CH₃NH₃PbI₃ in aqueous solution observed by single-particle spectroscopy Aito Takeuchi, Yoshitaka Kumabe, Takashi Tachikawa The 31st International Conference on Photochemistry 2023年7月 英語 ポスター発表 Sapporo Park Hotel, Sapporo, Japan 国際

11. 低温アニールによるヘマタイト光電極の電荷再結合抑制 隈部 佳孝, 立川 貴士 2023年光化学討論会 2023年9月 日本語 口頭発表(一般) 広島国際会議場 国内

12. In Situ Observation of Structural and Photoluminescence Properties of Organic-Inorganic Perovskites Formed in Aqueous Solution 竹内 愛斗,隈部 佳孝,立川 貴士 2023 年光化学討論会 2023 年 9 月 英語 ポスター発表 広島国際会議場 国内
13. 高選択的光過酸化水素生成に向けたヘマタイトメソ結晶の構造解析 西村 拓真,隈部 佳孝,立川 貴士 2023 年光化学討論会 2023 年 9 月 日本語 ポスター発表 広島国際会議場 国内
14. プラスチック分解物の高効率・高選択的酸化に向けた光触媒システムの設計 村尾 智央,隈部 佳孝,立川 貴士 2023 年光化学討論会 2023 年 9 月 日本語 ポスター発表 広島国際会議場 国内
15. 水浸条件下におけるスズ系有機無機ペロブスカイトの発光挙動 田中 直純,隈部 佳孝,立川 貴士 2023 年光化学討論会 2023 年 9 月 日本語 ポスター発表 広島国際会議場 国内
16. 自己再生能を有するペロブスカイト光触媒の発光観測 竹内 愛斗,隈部 佳孝,立川 貴士 第 12 回サイエンスフロンティア研究発表会 2023 年 10 月 日本語 ポスター発表 神戸大学理学部 国内
17. メソ結晶光触媒の展開 立川 貴士 超空間シンポジウム 2023 年 11 月 日本語 口頭発表(招待) KKR ホテル熱海 国内
18. 水溶液系における有機無機ペロブスカイトの単一粒子発光観測 立川 貴士,竹内 愛斗,隈部 佳孝 第 42 回固体・表面光化学討論会 2023 年 11 月 日本語 口頭発表(一般) 長野市ものづくり支援センター 国内
19. 自己再生型ペロブスカイト光触媒の顕微分光観測 竹内 愛斗,隈部 佳孝,立川 貴士 神戸大学研究基盤センター 若手フロンティア研究会 2023 年 12 月 日本語 ポスター発表 神戸大学 百年記念館 国内
20. スズ系有機無機ペロブスカイトの水中発光挙動の解析 田中 直純,隈部 佳孝,立川 貴士 神戸大学研究基盤センター 若手フロンティア研究会 2023 年 12 月 日本語 ポスター発表 神戸大学 百年記念館 国内
21. 太陽光水分解システムにおけるヘマタイト光電極性能の改善 隈部 佳孝,立川 貴士 日本化学会第 104 春季年会(2024) 2024 年 3 月 日本語 ポスター発表 日本大学理工学部 船橋キャンパス 国内
22. 溶液内動的平衡状態における有機無機ペロブスカイトのその場観測 竹内 愛斗,隈部 佳孝,立川 貴士 日本化学会第 104 春季年会(2024) 2024 年 3 月 日本語 口頭発表(一般) 日本大学理工学部 船橋キャンパス 国内
23. 水への安定性を示すスズ系ハライドペロブスカイトの発光挙動 田中 直純,隈部 佳孝,立川 貴士 日本化学会第 104 春季年会(2024) 2024 年 3 月 日本語 口頭発表(一般) 日本大学理工学部 船橋キャンパス 国内
24. 実験データの機械学習によるヘマタイト光電極の光触媒性能予測 西村 拓真,隈部 佳孝,原嶋 庸介,藤井 幹也,立川 貴士 第 71 回応用物理学会春季学術講演会 2024 年 3 月 日本語 ポスター発表 東京都市大学 世田谷キャンパス 国内

【書籍等】※下記の順で記載

タイトル 担当区分 著者名 出版社・発行元 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Conversion of Water and CO₂ to Fuels using Solar Energy: Science, Technology and Materials 分担執筆
Appu V. Raghu,Takashi Tachikawa Ceramic Materials for Photocatalytic/Photoelectrochemical Fuel Generation John Wiley & Sons, Inc. Feb-24 英語

【受賞】※下記の順で記載

賞名称 受賞者 受賞対象 授与機関名 受賞区分 受賞年月 国内国外区分

1. 高知化学シンポジウム 2023 優秀ポスター発表賞 竹内 愛斗,隈部 佳孝,立川 貴士 ペロブスカイト光触媒における界面電荷移動速度と水素生成活性の相関 高知化学会、高知工科大学 総合研究所 分子デザイン研究センター／構造ナノ化学研究センター 2023 年 7 月 国内

2. 第 37 回光化学協会賞 立川 貴士 単一粒子反応解析に基づく高効率光エネルギー変換系の構築 光化学協会
2023 年 9 月 国内
3. 令和5年度学長表彰(財務貢献) 立川 貴士 外部資金に措置される間接経費の獲得を通じ、本学の財務上の貢献が著しかった 国立大学法人神戸大学 2023 年 10 月 国内

2. 無機化学講座

2-1. 固体化学

[8] 持田 智行

課題1: 金属錯体系イオン液体の開発と物性評価

本課題は、金属錯体含有イオン液体の広範な物質開発を進め、外場による液体物性制御の実現につなげることを目的とする。

本年度は第一に、ルテニウム錯体含有光反応性イオン液体の外場応答性の開拓を進めた。これまで当研究室では、光と熱で可逆な構造転換を起こすルテニウム含有イオン液体を開発してきた。ここではその応答性を制御するため、第一に、置換基末端にジメチルアミノ基を有する錯体を用いたイオン液体を開発した。置換基の立体障害のため、この液体は光反応性に乏しかったが、シアノアルキル基を有するイオン液体を混合すると光反応を起こし、混合比に応じた反応率制御が実現した。これらの液体における光・熱によるイオン伝導度の可逆変化を検証した。第二に、二置換ルテニウム錯体に対して種々の配位性アニオンを組み合わせたイオン液体を開発した。この系では非配位性アニオンを有する系に比べて光反応速度および転換率が向上した。これは、光反応に伴ってアニオンがルテニウムに配位するためである。光生成物の構造はカチオンおよびアニオンの構造に応じて大きく異なり、多くの場合には光照射によってイオン液体からアモルファス低次元配位高分子に転換したが、いくつかの系では二核錯体や結晶性配位高分子が生じた。反応の可逆性はアニオンに依存し、光生成物が加熱で元のイオン液体に戻るもの、段階的に熱戻りするもの、熱分解するものがあった。このように、可逆反応性を持つ配位性アニオン含有イオン液体が初めて実現された。さらに、これらの光・熱反応に伴うイオン伝導度変化を検証した結果、非配位性アニオンを有する系に比べて変化が大きく、配位性アニオンの有用性が明らかになった。

第二に、化学反応に基づく刺激応答性液体の開発を目的として、二座共役配位子を有するルテニウム錯体をカチオンとするイオン液体を合成した。これらの液体の色・物性・反応性は、錯体の補助配位子(CO、MeCN、SMe₂、またはDMSO)に応じて異なり、CO錯体からなる液体は黄色、他は橙色～赤褐色だった。さらに、これらの液体は配位子交換によって相互変換を起こした。CO以外の配位子の間の交換反応は、過剰な配位子存在下での加熱で起こった。一方、COから他の配位子への交換は、配位子存在下でのUV光照射によって生じた。この系では、光によるCO放出が起こる点が特筆される。

第三に、二重結合を持つオニウム塩について、臭素付加による状態転換の実証を試みた。ここでは基礎的知見を得るため、金属イオンを含まない塩を用いた。ビニル基を導入したビススルホニルアミドをアニオンとするイオン液体は、臭素との反応で混合物を生じ、臭素付加体、その三臭化物塩、およびアニオン由来の環状付加体が生成した。一方、二重結合を持つオニウムカチオンからなる塩は、臭素との反応で付加体を定量的に生じた。この反応を通じ、イオン液体、柔軟性イオン結晶、および通常のイオン結晶の間での化学的相変換が実現した。

課題2: 金属錯体系柔軟性イオン結晶の開発と物性評価

本課題では、有機金属錯体を用いたイオン性プラスチック結晶(IPC)の物質開拓および機能性実現を目的とする。近年、固体電解質等の観点から有機IPCが注目されているが、有機金属錯体の研究例は少なく、機能性も未開拓である。

当研究室では昨年度、IPC相を示すハーフサンドイッチ型錯体を見出した。今年度は、その相挙動評価を継続した。固体NMRを適用して室温相での分子運動を検討した結果、この相ではカチオンが一軸回転を起こしてい

ることが判明した。粉末X線回折から、結晶多形の存在が判明し、それらのIPC相への相転移温度が異なることも見出された。

第二に、IPC相発現の条件の解明を目的として、一連のDMSO配位ハーフサンドイッチ型錯体および対応するサンドイッチ型錯体の塩の結晶構造と相転移挙動を検討した。後者の塩はほとんどがIPC相を発現したが、前者の塩はIPC相を発現しなかった。これらの比較から、IPC相の発現にはカチオン・アニオンの結晶中での交互配置が必須であることが判明した。また交互配置をとっている場合でも、カチオン周囲の環境の非対称性または分子間の立体障害が大きい場合には分子回転が阻害され、IPC相が発現しなかった。この傾向は、分子の対称性が低いハーフサンドイッチ型錯体は、本質的にIPC相を発現しにくいことを示唆している。一方、IPC相を発現した塩では、カチオン環境の対称性とIPC相への相転移温度の間に相関が見られた。これらの結果はいずれも、今後の有機金属系IPCの設計において極めて有用な知見である。

【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Organometallic Ionic Liquids Containing Sandwich Complexes: Molecular Design, Physical Properties, and Chemical Reactivities Tomoyuki Mochida 最終・責任著者 The Chemical Record 23(8) Apr-23 英語 有 研究論文(学術雑誌)
2. Substituent Effects on the Photoreactivity of Ru-containing Ionic Liquids Exhibiting Reversible Ionic Conductivity Changes Tomoyuki Mochida, Masato Shimada, Ryo Sumitani 筆頭著者 Journal of Molecular Liquids 381 121822-121822 Apr-23 英語 有 研究論文(学術雑誌)
3. Ionic liquids containing half-sandwich ruthenium complexes: in situ interconversions via photochemical and thermal ligand exchange Tomoyuki Mochida, Syou Maekawa, Ryo Sumitani 筆頭著者 New Journal of Chemistry 2023(47) 19096-19102 Oct-23 英語 有 研究論文(学術雑誌)
4. Ionic plastic crystals and ionic liquids containing quaternary cations with alkenyl substituents: chemical phase transformations by bromine vapor Yosuke Nakazono, Ryota Inoue, Ryo Sumitani, Tomoyuki Mochida 最終・責任著者 New Journal of Chemistry 48(5) 2219-2225 Jan-24 英語 有 研究論文(学術雑誌)
5. Thermal properties and bromine addition reaction of ionic liquids containing vinyl-substituted bis-sulfonylamide anion Ryo Sumitani, Yosuke Nakazono, Rio Soga, Tomoyuki Mochida 最終・責任著者 Journal of Molecular Liquids 397(2024) 124163 Mar-24 英語 有 研究論文(学術雑誌)

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. Formation of Coordination Polymers From Organometallic Ionic Liquids 持田智行 The 9th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems 2023 年 8 月 英語 口頭発表(招待) Makuhari Messe, Chiba 国際
2. Formation of Coordination Polymers from Organometallic Liquids T. Mochida The 2nd Kyoto Advanced Porous Science (KAPS) Symposium 2023 年 8 月 英語 口頭発表(一般) 京都大学 国際
3. Melting and Vittrification Behaviors of Anionic Coordination Polymers Incorporating Ionic Liquid Cations T. Mochida, Y. Qiu, T. Furushima 26th International Conference on Chemical Thermodynamics 2023 年 8 月 英語 口頭発表(一般) Senri Life Science Center, Osaka 国際
4. 金属錯体で創る多彩な機能性イオン液体 持田智行 日本分析化学会 第 72 年会 2023 年 9 月 日本語 口頭発表(招待) 熊本城ホール 国内

5. ハーフサンドイッチ型 Ru 錯体からなる柔粘性イオン結晶の構造と物性 井上亮汰,角谷凌,持田智行,桑原大介 第 17 回分子科学討論会 2023 年 9 月 日本語 口頭発表(一般) 大阪大学豊中キャンパス 国内
6. 二重結合を有するイオン液体の熱的性質および化学反応性 中園陽介 第 12 回サイエンスフロンティア研究発表会 2023 年 10 月 日本語 ポスター発表 神戸大学 国内
7. ハーフサンドイッチ型錯体からなる柔粘性イオン結晶の合成と物性評価 井上亮汰 第 12 回サイエンスフロンティア研究発表会 2023 年 10 月 日本語 ポスター発表 神戸大学 国内
8. ビニル基を有するアニオンを含むイオン液体の熱的性質および化学反応性 中園陽介,角谷凌,持田智行 第 13 回 CSJ 化学フェスタ 2023 2023 年 10 月 日本語 ポスター発表 タワーホール船堀 国内
9. ハーフサンドイッチ型 Ru 錯体からなる柔粘性イオン結晶の開発 井上亮汰,角谷凌,持田智行,桑原大介 第 13 回 CSJ 化学フェスタ 2023 2023 年 10 月 日本語 ポスター発表 タワーホール船堀 国内
10. 有機金属錯体からなる柔粘性イオン結晶・イオン液体 持田智行 THE CHEMICAL TIMES -柔粘性結晶- WEB セミナー 2023 年 10 月 日本語 口頭発表(招待) オンライン開催 国内
11. 遷移金属を含む多彩な機能性液体 持田智行 第 8 回相模材料セミナー 2023 年 11 月 日本語 口頭発表(招待) 相模中央化学研究所 国内
12. 配位性アニオンを用いた光反応性 Ru 含有イオン液体の開発 小篠遥,島田壮人,井上亮汰,持田智行 第 13 回イオン液体討論会 2023 年 11 月 日本語 ポスター発表 朱鷺メッセ 国内
13. ポリオキシメタレートに対アニオンとするサンドイッチ型錯体の構造と熱物性 井上亮汰,持田智行,荻原直希 第 13 回イオン液体討論会 2023 年 11 月 日本語 ポスター発表 朱鷺メッセ 国内
14. Ru 錯体含有イオン液体の外部刺激によるイオン伝導度制御 島田壮人,井上亮汰,持田智行 第 13 回イオン液体討論会 2023 年 11 月 日本語 ポスター発表 朱鷺メッセ 国内
15. 二重結合を有するイオン液体の臭素付加反応および双性イオン形成反応 中園陽介,角谷凌,持田智行 第 13 回イオン液体討論会 2023 年 11 月 日本語 口頭発表(一般) 朱鷺メッセ 国内
16. 金属錯体からなるイオン液体の多彩な機能性 持田智行 第 54 回中部化学関係学協会支部連合秋季大会 2023 年 11 月 日本語 口頭発表(招待) 三重大学 国内
17. 二重結合を有する四級塩における結晶相・柔粘性結晶相・液相間の化学的相転換 中園陽介,井上亮汰,角谷凌,持田智行 第 31 回有機結晶シンポジウム 2023 年 11 月 日本語 ポスター発表 大阪大学 国内
18. シアノ系アニオンを有する有機金属柔粘性イオン結晶の構造と熱的性質 井上亮汰,島田壮人,持田智行 神戸大学研究基盤センター「若手フロンティア研究会 2023」 2023 年 12 月 日本語 ポスター発表 神戸大学 国内
19. 金属含有イオン液体を用いた配位高分子膜の作成と物性評価 小篠遥 2023 年度先端膜工学研究推進機構春季講演会 2024 年 3 月 日本語 ポスター発表 神戸大学 国内
20. シアノ系アニオンを有する有機金属柔粘性イオン結晶の構造および相挙動 井上亮汰,島田壮人,持田智行 日本化学会第 104 春季年会 2024 年 3 月 日本語 口頭発表(一般) 日本大学理工学部 船橋キャンパス 国内

[9] 内野 隆司

課題1: 超伝導/常伝導フラクタルナノ複合体の合成, 構造及び超伝導特性

超伝導体 (S) と常伝導体 (N) のヘテロ構造は, バルク物質とは異なる特異な量子現象を示す。中でも, 最も興味深い現象が, 超伝導体と常伝導体の界面, すなわち S/N 界面で, 常伝導相が超伝導体の性質を帯びる現象である。この現象は, 超伝導近接効果と呼ばれ, 超伝導を微視的に理解する上で重要であるばかりでな

く、ジョセフソン接合素子などの超伝導デバイスを構築，設計する上での理論的基盤となっている。

本研究では，近年我々が報告した Mg / MgO / MgB₂ ナノ複合体について，超伝導特性の向上を目指し，試料作製における最適条件を探索した。最適条件で合成した試料については，高分解能走査型透過顕微鏡 (Scanning Transmission Electron Microscope : STEM) を用いた原子レベルの界面観察，FIB-SEM (Focused Ion Beam- Scanning Electron Microscope) トモグラフィー法を用いた元素の 3 次元分布の再構築，及び放射光を用いた高分解能光電子分光測定を行った。これらの測定から，超伝導近接効果と密接に関係している界面のクリーンさや MgB₂ の 3 次元的な分布，及び試料の超伝導ギャップの有無などについて解析した。また，Mg / MgO / MgB₂ ナノ複合体中に超伝導近接効果によって位相コヒーレンスが形成されているのであれば，MgB₂ 含有量を増加させることで超伝導近接効果が増強されることが期待される。そこで，本研究では，異なる MgB₂ 含有量を有する Mg / MgO / MgB₂ ナノ複合体を作製し，それらの超伝導特性を評価した。以下に，得られた研究結果の概要を記す。

試料作製条件を探索した結果，焼結温度 1100 °C 前後，昇温速度 400 K/min 以上，焼結圧力 57 MPa 以上の Spark Plasma Sintering (SPS) 条件で作製した試料が超伝導転移温度，臨界電流密度，磁束のピンニング力などのあらゆる点において最も優れた超伝導特性を示した。高分解能 STEM 観察から，最適条件で SPS 焼結した Mg / MgO / MgB₂ ナノ複合体が原子レベルでクリーンな MgO / MgB₂ 界面を有していることが分かった。また，光電子分光測定により，Mg / MgO / MgB₂ ナノ複合体中には，明確な超伝導ギャップが存在しないことが分かった。これは，本ナノ複合体の MgB₂ そのもののギャップ生成に由来するのではなく，超伝導近接効果による強い位相整合の発現に起因することを示している。従って，高圧の SPS 焼結によってクリーンな S/N 界面を保持したまま試料を緻密化させることにより，常伝導相及び界面を含むバルク全体に及ぶ位相コヒーレンスが形成されたと考えられる。

Mg / MgO / MgB₂ ナノ複合体中の MgB₂ 含有量を増加させることで転移温度や磁束ピンニング力などの超伝導近接効果が増強されることが明らかになった。この MgB₂ 増加ナノ複合体では，特に，下部臨界磁場の上昇及び磁場侵入長の増加が顕著であった。磁場侵入長は位相の剛直性と深く関係していることから，MgB₂ 増加ナノ複合体における超伝導特性の向上は，MgB₂ 濃度の増大によるクーパー対濃度の上昇と，それに伴う位相の剛直性の増大によってもたらされたものと考えられる。

さらに，MO イメージング測定により，粒界を含めて超伝導近接効果により超伝導化した常伝導領域が高い磁束ピンニング力を有することが分かった。このような系全体で完全反磁性を示すバルクの超伝導の発現は，本ナノ複合体のクリーンな界面及びフラクタル構造を介してジョセフソン接合ネットワークループが階層的に生じたためであると考えられる。また，走査 SQUID 顕微鏡観察を行い，常伝導領域に侵入した磁束が量子化された渦糸構造を有することを観測した。

また，ジョセフソンループに由来するゼロ磁場下での自発磁束の形成過程について新たな知見を得るため，ゼロ磁場及び極低磁場下での磁場分布を観察した。ZF-μSR 測定から，試料内の磁場分布の変化が自発的に生じることが分かった。また，走査 SQUID 顕微鏡観察を用いて，印加磁場がほとんどゼロと考えられる条件下で渦糸が形成されることを示した。これらの一連の結果は，超伝導転移に伴い，渦糸が自発的に形成されることと矛盾しない実験事実が得られたことを示している。この自発渦糸は，FIB-SEM トモグラフィー像に示された，複雑に入り組んだ MgB₂ リッチ領域内に存在すると考えられる。

課題2： 層間酸塩基反応による六方晶窒化ホウ素剥離膜の作製とその構造及び物性解析

六方晶窒化ホウ素 (h-BN) は約 6 eV のバンドギャップエネルギーを有するワイドギャップ半導体である。h-BN はグラファイトに類似した層状ハニカム構造を有し，潤滑性，電気絶縁性，熱伝導度，化学的・熱的安定性

に優れている。そのため、固体潤滑剤、X線リソグラフィー用マスク材料、るつぼ原料 などとして用いられてきた。

h-BNはグラファイト、層状複水酸化物(Layered Double Hydroxide, LDH)、遷移金属ダイカルコゲナイド(Transition Metal Dichalcogenide, TMD)などと同様に、代表的な二次元層状材料として知られている。二次元層状材料を用いると、層間に他の分子やイオンが挿入されたいわゆるインターカレーション化合物(または層間化合物ともいう)を作製することができる。Kovtyukhovaらは2013年にh-BNとブレンステッド酸の混合液を大気中で加熱することで酸分子がh-BNの層中に容易にインターカレーション可能であることを報告した。さらに、Kovtyukhovaらは、同種の層間化合物がグラフェンやh-BNの単層シートの作製にも応用できることを報告している。h-BNの単層および複層ナノシートはドーパミンやセロトニンを検出するセンサーや、触媒に応用されている。以上の理由から、h-BNの単層および複層ナノシートの作製法およびその構造、物性に関して近年数多くの研究がなされている。

そこで、本研究では、h-BNナノシートの新たな合成法を開発する目的でインターカレーション反応を利用してh-BN/H₂SO₄層間化合物を作製し、その層間化合物をNaHCO₃と反応させることでh-BNの剥離を試みた。さらに、得られた上澄み液を1-ペンタノールで溶媒抽出することにより、h-BNナノシートが高濃度に分散したコロイド溶液を得た。このようにして得られたh-BNナノシートを原子間力顕微鏡(Atomic Force Microscope, AFM)、透過型電子顕微鏡(Transmission Electron Microscope, TEM)を用いて、その形状、原子配列を観察した。さらに、h-BNナノシートのコロイド溶液光学特性を吸収スペクトル測定および発光(Photoluminescence, PL)・発光励起(Photoluminescence excitation, PLE)スペクトル測定により観察した。以下では、得られた研究結果の概要を述べる。

h-BN粉末とH₂SO₄の混合液をオートクレーブで処理することでh-BN/H₂SO₄層間化合物を合成することができた。h-BN/H₂SO₄層間化合物をとNaHCO₃を反応させることで、Na₂SO₄をh-BN/H₂SO₄層間化合物の層間で成長させ、h-BN膜を90%以上の収率で剥離することができた。h-BN剥離膜が分散した溶液を1-ペンタノールで溶媒抽出することにより、h-BN剥離膜とNa₂SO₄を分離することができた。この手法は粒径10–30 μmのh-BNを原料として用いる場合に有効である。得られたh-BN剥離膜は幅0.6–2 μm、7–10層程度が積層したものであった。幅の大きいh-BN剥離膜を得るためにはオートクレーブ処理時間は長い方が望ましいが、結晶性の良いh-BN剥離膜を得るためにはオートクレーブ処理時間は短い方が望ましい。これは、オートクレーブ処理時間が長いほどh-BNに導入される欠陥が多くなり、結晶性が悪くなるためであると考えられる。TEM観察においてモアレ模様が観察された箇所についてFFT、IFFTを行ったところ、モアレ模様を形成しているシート1枚ずつのHR-TEM画像が得られた。また、h-BN剥離膜が分散した1-ペンタノール溶液を加熱して濃縮し、EtOHで希釈することによって、短時間のオートクレーブ処理で幅が大きく結晶性の良いh-BN剥離膜を得ることができた。得られたh-BN剥離膜は幅最大6.5 μm、1–4層程度が積層したものであった。TEM観察において広範囲でモアレ模様が観察された箇所について、FFT像中の六角形状の逆格子とそれら以外の回折点についてそれぞれIFFTを行うことにより、原子配列の重なりによるモアレ構造の影響を取り除くことができ、その結果、回転積層に由来する長周期のポテンシャルのみを抽出することができた。STEM観察の結果、得られたh-BNナノシートはAAスタッキングしていることが示唆された。以上の結果は、大面積かつ結晶性の良いh-BNナノシートの新しい剥離手法を提供するだけでなく、回転積層膜が作るモアレポテンシャルの原子レベルでの観察法を提案するものである。この手法はh-BNのみならず、グラフェンやTMDなど他の二次元層状物質へ適用可能であり、今後のさらなる研究の進展が期待できる。

【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Mechanism of THz dielectric constant enhancement in multi-component oxide glasses investigated by infrared and THz spectroscopies Osamu Wada,Doddoji Ramachari,Chan-Shan Yang,Yukihiro Harada,Takashi Uchino,Ci-Ling Pan Elsevier BV Journal of Physics and Chemistry of Solids 176 111237 May-23 英語 有 研究論文(学術雑誌)
2. Excitonic processes and lasing in ZnO thin films and micro/nanostructures Aika Tashiro,Yutaka Adachi,Takashi Uchino 最終・責任著者 AIP Publishing Journal of Applied Physics 133(22) 22 Jun-23 英語 有 研究論文(学術雑誌)
3. Strong phase coherence and vortex matter in a fractal system with proximity-induced superconductivity Nanami Teramachi,Iku Nakaaki,Aoi Hashimoto,Shuuichi Ooi,Minoru Tachiki,Shunichi Arisawa,Yusuke Seto,Takahiro Sakurai,Hitoshi Ohta,Jaroslav Valenta,Naohito Tsujii,Takao Mori,Takashi Uchino 最終・責任著者 American Physical Society (APS) Physical Review B 108(15) 15 Oct-23 英語 有 研究論文(学術雑誌)
4. Fermi-edge singularity and related emission from degenerate semiconductors: Transition from a spontaneous to a stimulated process Aika Tashiro,Toshihiro Nakamura,Yutaka Adachi,Yoshiki Wada,Takashi Uchino 最終・責任著者 American Physical Society (APS) Physical Review B 109(7) 7 Feb-24 英語 有 研究論文(学術雑誌)
5. Absorption dispersion below boson peak frequency in oxide glasses studied by THz-time domain spectroscopy Osamu Wada,Doddoji Ramachari,Chan-Shan Yang,Takashi Uchino,Ci-Ling Pan AIP Publishing Journal of Applied Physics 135(8) 8 Feb-24 英語 有 研究論文(学術雑誌)

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. 乱層窒化ホウ素の構造・発光特性に及ぼす作製条件の効果 前田楓太,内野隆司 第17回日本セラミックス協会関西支部学術講演会 2023年7月 日本語 ポスター発表 東大阪 国内
2. 酸塩基反応を用いた六方晶窒化ホウ素(h-BN)の剥離膜の作製と発光特性 三嶋里奈,安達裕,瀬川浩代,内野隆司 第17回日本セラミックス協会関西支部学術講演会 2023年7月 日本語 ポスター発表 東大阪 国内
3. Mg/MgO/MgB₂ナノ複合体の超伝導特性に及ぼす構造および組成の効果 中明育,櫻井敬博,太田仁,瀬戸雄介,大井修一,立木実,有沢俊一,内野隆司 第17回日本セラミックス協会関西支部学術講演会 2023年7月 日本語 ポスター発表 東大阪 国内
4. 超伝導/常伝導ナノ複合体の自発渦糸形成 中明育,櫻井敬博,太田仁,瀬戸雄介,大井修一,立木実,有沢俊一,幾原雄一,近藤隼,大石一城,坂口佳史,幸田章宏,内野隆司 第84回応用物理学会秋季学術講演会 2023年9月 日本語 口頭発表(一般) 熊本 国内
5. グラファイト層間化合物の酸塩基反応を用いたナノシートの作製とその発光特性 白木 秀岳,安達裕,内野隆司 第36回日本セラミックス協会秋季シンポジウム 2023年9月 日本語 口頭発表(一般) 京都工芸繊維大学 国内
6. 酸塩基反応を用いた六方晶窒化ホウ素(h-BN)ナノシートの作製と発光特性 三嶋里奈,安達裕,瀬川浩代,内野隆司 第36回日本セラミックス協会秋季シンポジウム 2023年9月 日本語 口頭発表(一般) 京都工芸繊維大学 国内
7. Mg/MgO/MgB₂フラクタルナノ複合体の超伝導特性に及ぼす界面構造とMgB₂含有量の効果 中明育,櫻井敬博,太田仁,瀬戸雄介,大井修一,立木実,有沢俊一,幾原雄一,近藤隼,内野隆司 第36回日本セラミックス協会秋季シンポジウム 2023年9月 日本語 口頭発表(一般) 京都工芸繊維大学 国内
8. グラファイトの層間化学反応を利用した グラファイトナノシートの作製 白木 秀岳,安達裕,内野隆司 第84回応用物理学会秋季学術講演会 2023年9月 日本語 口頭発表(一般) 熊本 国内

9. 六方晶窒化ホウ素の層間酸塩基反応を用いた剥離膜の作製と発光特性 三嶋里奈,安達裕,瀬川浩代,内野隆司 第84回応用物理学会秋季学術講演会 2023年9月 日本語 口頭発表(一般) 熊本 国内
10. 巨視的位相コヒーレンスを示す超伝導ナノ複合体の界面及び磁束構造観察 中明育,櫻井敬博,太田仁,瀬戸雄介,大井修一,立木実,有沢俊一,幾原雄一,近藤隼,内野隆司 第84回応用物理学会秋季学術講演会 2023年9月 日本語 口頭発表(一般) 熊本 国内
11. 超伝導/常伝導フラクタルナノ複合化合物の自発渦糸形成 中明育,櫻井敬博,太田仁,瀬戸雄介,大井修一,立木実,有沢俊一,幾原雄一,近藤隼,大石一城,坂口佳史,幸田章宏,内野隆司 第29回渦糸物理ワークショップ 2023年12月 日本語 口頭発表(一般) 東北大学 国内
12. 超伝導フラクタルナノ複合体の位相コヒーレンス形成と渦糸構造 寺町七海,中明育,橋本碧維,大井修一,立木実,有沢俊一,櫻井敬博,太田仁,幾原雄一,J. Valenta,辻井直人,森孝雄,内野隆司 第29回渦糸物理ワークショップ 2023年12月 日本語 口頭発表(一般) 東北大学 国内

【受賞】※下記の順で記載

賞名称 受賞者 受賞対象 授与機関名 受賞区分 受賞年月 国内国外区分

1. 日本セラミックス協会秋季シンポジウム学生優秀講演賞 中明 育 Mg/MgO/MgB₂ フラクタルナノ複合体の超伝導特性に及ぼす界面構造と MgB₂ 含有量の効果 日本セラミックス協会秋季シンポジウム特定セッション「ハイブリッドと創発物性」国内学会・会議・シンポジウム等の賞 2023 年 9 月 国内
2. 第29回渦糸物理ワークショップ学生優秀発表賞 中明 育 超伝導/常伝導フラクタルナノ複合化合物の自発的渦糸形成 第29回渦糸物理ワークショップ 2023 年 12 月 国内

【 10 】 高橋 一志

課題:金属錯体を基盤とした新しい機能性を持つ分子性錯体の開発と評価

テーマ1. 外場応答型分子性金属錯体の開発と転移メカニズムの解明

スイッチング特性を持つ分子性物質のスイッチング温度やスイッチング挙動を自在に制御することは、分子性物質のスイッチングのメカニズムの解明という基礎的な観点からも機能性物質としての応用の観点から重要な課題である。我々は温度、光、圧力などの外部刺激により金属錯体の中心金属イオンのスピン状態が低スピンと高スピンの間でスイッチするスピנקロスオーバー(SCO)や金属-配位子間電子移動現象である原子価互変異性に着目し研究を進めている。また、電気伝導性や誘電性、磁性に大きな影響を与える混合原子価現象に着目し新規機能性を探索した。

(1)アニオン性鉄(III)スピנקロスオーバー錯体のスピנקロスオーバー転移の置換基効果

アゾビスフェノール(azp)配位子からなるホモレプティック鉄(III)錯体がスピנקロスオーバーを示すことを以前明らかにした。しかし、これまでその置換基効果に関して検討されてこなかった。今回、ハロゲン置換基を導入した azp 配位子を合成し、鉄(III)錯体の合成を行った。フッ素と塩素を導入した azp 配位子は従来通りのジアゾカップリングと脱メチル化で合成できたが、臭素とヨウ素を導入した azp 配位子はジアゾカップリングが進まないことが分かった。様々な合成法を検討したが、現時点で臭素置換体はジアゾニウム塩の銅錯体を触媒としたカップリング反応で低収率ながら合成することができた。得られた azp 配位子を用いて鉄(III)錯体をテトラメチルアンモニウム塩として単離した。いずれも単結晶として得られ構造解析に成功し、フッ素置換体と塩素置換体は同形であることが分かった。磁化の温度依存性から、フッ素誘導体と塩素誘導体は SCO を示し、転移温度は塩素置換

タイの方が高いことが分かった。これはこれまでに知られている置換基の誘起効果によるものと合致している。一方、臭素置換体はすべての温度でほぼ高スピン状態を取ることが分かった。こちらは、結晶中のパッキングの違いによる効果と考えられる。今後、ヨウ素置換体の合成を検討し、結晶構造と磁性との相関を明らかにしていく予定である。

(2) アゾビスフェノレート配位子と類縁配位子からなる金属錯体の機能開拓

アゾビスフェノレート配位子は酸化還元活性の三座配位子と考えられ、金属と配位子の間での電子移動現象である原子価互変異性を示す可能性がある。これまでアニオン性ホモレプティック Ni^{III} 錯体が原子価互変異性もしくはスピנקロスオーバーのいずれかを示唆する磁性の非可逆転移を示すことを報告してきた。

①非可逆転移の開始前後で Ni^{III} 錯体を室温へ戻すと、その状態を保持できることが分かった。そこで、 Ni^{III} 錯体を 350 K で数時間保持したところ、時間に伴い磁化の上昇が観測された。そのサンプルを温度低下させても χ_{MT} 値は上昇した値で保持されることが分かった。さらに 5 ヶ月室温で置くと、 Ni^{III} 錯体の χ_{MT} 値は Ni^{II} 錯体に相当する値まで上昇することが分かった。それぞれの状態の XPS を測定したところ、加熱処理により Ni^{III} 錯体から徐々に配位子に電子移動が起こり Ni^{II} へと変化していくことを示唆された。一方、配位子に生じたラジカルの再結合しているものと考えられる。今後、強磁場 ESR により、この Ni^{III} から Ni^{II} への電子移動の過程を明らかにしていく予定である。

②azp 配位子の酸化を受けやすくすることを考え、電子供与性のメキシ基を導入した azp 配位子からなる Ni 錯体について昨年度検討した。今年度は 3d 金属イオンを中心としたアニオン性錯体の合成とその一電子酸化による中性混合原子価錯体の合成を試みた。アニオン性錯体としては、 Al^{III} , Cr^{III} , Mn^{III} , Fe^{III} , Co^{III} 錯体を得ることができ、結晶構造解析にも成功した。これらのアニオン性錯体のアセトニトリル溶液に臭素水の蒸気拡散させることで、中性錯体の合成を検討した。その結果、 Cr^{III} , Mn^{IV} , Co^{III} 錯体を得られたが、 Cr^{III} と Co^{III} 錯体には、配位子の一部臭素化が示唆された。今後、電解酸化法などより不純物の無い中性混合原子価錯体の単離を検討し、それらの磁性や電気伝導性を検討していく予定である。

③配位子の酸化に対する安定性の向上を考え、嵩高い置換基を導入した azp 類縁体のシッフ塩基配位子からなる Co^{III} 錯体の合成を検討した。フェノレートのオルト位に嵩高い置換基を導入したにも関わらず、ホモレプティック Co^{III} 錯体アニオンを単離することに成功した。さらに臭素水の蒸気拡散により中性 Co 錯体の単結晶を得ることに成功した。得られた中性 Co 錯体の磁化率と ESR の測定から、配位子が混合原子価状態を取っていることが示唆された。さらに、近赤外領域に弱い原子価間電荷移動遷移に対応すると考えられる吸収が観測された。今後、この Co 錯体の混合原子価状態を明らかにしていく予定である。

テーマ2. 酸化還元活性配位子からなる分子性錯体の構造と物性

含窒素芳香環を有する酸化還元活性配位子は、金属イオンとの配位能に加え、塩基性によるプロトン受容能も持つ。このような多機能な配位子からなる分子性錯体では、金属イオン上の d スピン、配位子上の π スピン、さらにプロトンがカップルする可能性があり、新奇な固体の機能性を創出することが期待される。昨年度合成したピリジル基を芳香環のパラ位に導入した直線架橋型酸化還元活性配位子を用い、金属イオンとの配位高分子の合成を検討した。鉄(II)イオンとの錯形成では、二次元グリッド状の配位高分子の単結晶を得ることができた。この単結晶は結晶化溶媒を含んでおり、含溶媒体はすべての温度領域で高スピン状態であったが、溶媒を加熱により除くと、スピנקロスオーバーを示すことが明らかとなった。含溶媒体と脱溶媒体のいずれについても結晶構造解析を行ったところ、溶媒の脱離により、鉄イオンに配位する4つのピリジル環の配列がパラレル型からプロペラ型へと変化していることが明らかとなった。これは配位構造変化が磁性変化の要因であることを明らかにすることができた。

【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Pressure Effect of Spin Gap Substance $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$ Takahiro Sakurai, Ryosuke Takehara, Naoki Nagasawa, Hideyuki Takahashi, Makoto Saga, Kazuyuki Takahashi, Susumu Okubo, Hitoshi Ohta JPS Conference Proceedings 38 11145 May-23 英語 有 研究論文(国際会議プロシーディングス)
2. Photoisomerization of “Partially Embedded Dihydropyridazine” with a Helical Structure Kazuteru Usui, Ami Amano, Kasumi Murayama, Miho Sasaya, Ryota Kusumoto, Tomohiro Umeno, Satsuki Murase, Naoko Iizuka, Shota Matsumoto, Yasufumi Fuchi, Kazuyuki Takahashi, Masatoshi Kawahata, Yasuhiro Kobori, Satoru Karasawa Chemistry - A European Journal 29(62) Aug-23 英語 有 研究論文(学術雑誌)

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. 直線架橋型新規酸化還元活性配位子とその配位高分子の合成と性質 石野 圭一郎, 高橋 一志, 櫻井 敬博, 太田 仁 第 17 回分子科学討論会 2023 年 9 月 日本語 口頭発表(一般) 大阪大学豊中キャンパス 国内
2. ハロゲン置換基を導入したアゾビスフェノレート配位子を有する鉄(III)錯体のスピントロニクス挙動 広田 舞, 高橋 一志, 櫻井 敬博, 太田 仁 第 17 回分子科学討論会 2023 年 9 月 日本語 ポスター発表 大阪大学豊中キャンパス 国内
2. 電子供与性基を有するアゾビスフェノレート配位子からなるニッケル錯体の合成と特性評価 笠崎 泰世, 櫻井 敬博, 太田 仁, 高橋 一志 第 17 回分子科学討論会 2023 年 9 月 日本語 ポスター発表 大阪大学豊中キャンパス 国内
4. 嵩高い置換基を有するアゾ配位子からなるニッケル錯体の合成と性質 野口 拓海, 櫻井 敬博, 大久保 晋, 太田 仁, 高橋 一志 第 17 回分子科学討論会 2023 年 9 月 日本語 口頭発表(一般) 大阪大学豊中キャンパス 国内
5. スピントロニクス複合体試料における光励起応答の励起波長依存性 石川 忠彦, 高橋 良弥, 中野 真之介, Samiran Banu, 田久保 耕, 沖本 洋一, 腰原 伸也, 宮脇 敦大, 高橋 一志 日本物理学会 第 78 回年次大会(2023) 2023 年 9 月 日本語 口頭発表(一般) 東北大学 川内キャンパス 国内
6. 電子供与性基を導入したアゾ配位子を有するニッケル錯体の合成と性質 笠崎 泰世, 高橋 一志, 櫻井 敬博, 太田 仁 第 12 回サイエンスフロンティア研究発表会 2023 年 10 月 日本語 ポスター発表 神戸大学理学部 国内
7. 電子供与性基を導入したアゾ配位子を有する ニッケル錯体の合成と性質 笠崎泰世, 高橋一志, 櫻井敬博, 太田仁 第 12 回サイエンスフロンティア研究発表会 2023 年 10 月 日本語 ポスター発表 神戸大学理学部 国内
8. 酸化還元活性配位子を有する Ni(III) 錯体の示す原子価不安定性 野口 拓海, 宮脇 敦大, 持田 智行, 櫻井 敬博, 大久保 晋, 太田 仁, 高橋 一志 第 31 回有機結晶シンポジウム 2023 年 11 月 日本語 口頭発表(一般) 銀杏会館(大阪大学吹田キャンパス) 国内
9. 鉄(II)錯体の示す二段階スピン転移のメカニズム 高橋 一志, 松本 一樹, 櫻井 敬博, 太田 仁 第 31 回有機結晶シンポジウム 2023 年 11 月 日本語 ポスター発表 銀杏会館(大阪大学吹田キャンパス) 国内
10. 二次元鉄(II)配位高分子のゲスト分子による磁性変化 石野 圭一郎, 櫻井 敬博, 太田 仁, 高橋 一志 第 31 回有機結晶シンポジウム 2023 年 11 月 日本語 ポスター発表 銀杏会館(大阪大学吹田キャンパス) 国内
11. Photoinduced Dynamics in the spin-crossover hybrid system probed by intra-molecular vibrational spectra T. Ishikawa, R. Takahashi, S. Nakano, S. Banu, Y. Okimoto, S. Koshihara, A. Miyawaki, K. Takahashi, Y. Jiang, Stuart A Hayes, R. J. D. Mille Phase Transition and Dynamical Properties of Spin Transition Materials 2023 2023 年 11 月 英語 口頭発表(一般) The University of Tokyo 国際

12. Interaction Energy Analysis of Charged Iron(III) Spin-Crossover Complexes Kazuyuki Takahashi, Ryosuke Azuma, Tomoyuki Mochida, Takahiro Sakurai, Hitoshi Ohta Phase Transition and Dynamical Properties of Spin Transition Materials 2023 2023 年 11 月 英語 口頭発表(一般) The University of Tokyo 国際
13. 電子供与性基を有するアゾ配位子からなる Ni 錯体の性質 笠崎 泰世, 櫻井 敬博, 太田 仁, 高橋 一志 若手フロンティア研究会 2023 2023 年 12 月 日本語 ポスター発表 神戸大学百年記念館 国内
14. スピנקロスオーバー鉄(III)錯体のハロゲン置換効果 広田 舞, 高橋 一志, 櫻井 敬博, 大久保 晋, 太田 仁 若手フロンティア研究会 2023 2023 年 12 月 日本語 ポスター発表 神戸大学百年記念館 国内
15. 2 次元鉄(II)配位高分子のゲスト脱離に伴う構造と磁性の変化 石野 圭一郎, 櫻井 敬博, 太田 仁, 佐藤寛泰, 高橋 一志 若手フロンティア研究会 2023 2023 年 12 月 日本語 ポスター発表 神戸大学百年記念館 国内
16. 酸化還元活性なアゾ配位子を有する Ni(III)錯体の原子価不安定性 野口 拓海, 宮脇 敦大, 持田 智行, 櫻井 敬博, 大久保 晋, 太田 仁, 高橋 一志 若手フロンティア研究会 2023 2023 年 12 月 日本語 ポスター発表 神戸大学百年記念館 国内
17. アゾ配位子を有する Ni(III)錯体の原子価不安定性 野口 拓海, 宮脇 敦大, 持田 智行, 櫻井 敬博, 大久保 晋, 太田 仁, 高橋 一志 日本化学会第 104 春季年会 2024 年 3 月 日本語 口頭発表(一般) 日本大学理工学部船橋キャンパス 国内
18. ハロゲン置換基がスピנקロスオーバー鉄(III)錯体にもたらす電子的、立体的効果 広田 舞, 櫻井 敬博, 太田 仁, 高橋 一志 日本化学会第 104 春季年会 2024 年 3 月 日本語 口頭発表(一般) 日本大学理工学部船橋キャンパス 国内

2-2. 状態解析化学

[11] 富永 圭介

課題:主に超短パルスレーザー分光を用いた液体中における化学反応と緩和過程の研究

メンバー: 富永圭介、太田薫(分子フォトサイエンス研究センター、学術研究員)、張峰(分子フォトサイエンス研究センター、研究協力員)

研究テーマ 1. 非線形赤外分光による水溶液中における溶質分子の振動ダイナミクス

溶液中において、溶質分子の振動状態は周囲の溶媒との相互作用により絶えず変化する。サブピコ秒で変化する溶質の振動状態やその周囲の溶媒ダイナミクスを理解するためにフェムト秒パルスを用いた非線形赤外分光測定が行われ、水溶液中では水素結合の生成・開裂が振動エネルギー緩和や異方性減衰に影響を及ぼすことが知られている。特に、二次元赤外(2D-IR)分光法からは溶質分子の遷移振動数の揺らぎの時間相関関数(Frequency-frequency time correlation function; FFTCF)が得られ、FFTCFは指数関数や定数項の和として表現される。我々のグループでは、水溶液中における溶質分子の振動モードの遷移振動数の揺らぎに関して、実験的には、二次元赤外分光法による測定を行い、分子動力学(MD)シミュレーションも行い、二次元分光法の測定結果の分子論的な解釈を議論してきた。これまで様々な水溶液中におけるイオン分子の FFTCF が調べられ、指数関数の減衰の時定数は溶質周囲の水素結合ネットワーク構造の揺らぎを反映し、約 1 ps になることが知られている。

令和 5 年度では、温度応答性高分子を溶かした水溶液について詳しく検討を行った。ポリ *N,N*-ジエチルアクリルアミド(PdEA)は、水溶液中において約 32 °Cでその分子構造を変化させる。低温では分子鎖が伸びたコイ

ル状態をとるが、高温になると凝縮したグロビュール状態になり、さらに凝縮体が凝集することで相分離が発生する。この相転移は側鎖の炭化水素基の疎水性相互作用に由来すると考えられているが、時間分解分光法による水和水の揺らぎの知見は限られている。本研究では PdEA の CO 伸縮振動の揺らぎを観測し、揺らぎのダイナミクスの解明を目的とした。高分子鎖の構造変化により CO 基周辺の水和水による環境が変化するため、それによる CO 伸縮振動の揺らぎへの影響も検討した。さらに PdEA の単量体に相当する *N,N*-ジエチルプロピオンアミド(dEP)も併せて調べた。得られた CLS の時間発展に対して単一指数関数によるフィッティングを行った結果、dEP では 1.4 ps と 0.86 ps、PdEA では 4.2 ps と 5.2 ps の時定数が、24℃及び 36℃でそれぞれ得られた。dEP の結果は先行研究と同様に、集団的な水素結合の生成・開裂が反映されていることが示唆された。温度上昇による時定数の減少は熱運動による、水素結合ダイナミクスがより速くなることに由来すると考えた。一方、PdEA の場合は、排除体積効果により水和水の回転運動が遅くなること、および炭素骨格のねじれ運動に伴う遅い揺らぎを反映していることが MD 計算から示唆された。dEP とは異なり、カルボニル基周辺の水和水による微視的な環境は主鎖または側鎖からの束縛の影響を受けると考えられる。そのため、PdEA の時定数が高温で遅くなる理由として、グロビュール状態への遷移により非常に遅い時間スケールで揺らぐ骨格の揺らぎが反映されているためであると考えられた。すなわち、疎水性相互作用による凝集に伴い、高分子内部に閉じ込められた水分子の運動が反映されていると考えた。

研究テーマ 2. テラヘルツ波分光による分子集合体の低振動ダイナミクス

低振動スペクトルには、凝縮相、液体や溶液、高分子、特に生体高分子の分子間の相互作用や遅いダイナミクスに関する情報が存在することから、遠赤外領域に周波数を持つテラヘルツ電磁波を用いた分光実験を行っている。海外及び国内のテラヘルツ波を用いた研究が産業応用へ向かう中、我々は基礎的な分光実験に特化している。分子性結晶において観測されるテラヘルツ帯の振動バンドの詳細を、極低温における測定と固体状態密度汎関数法による計算から検討している。また、テラヘルツ帯の振動モードを解析し、分子間振動と分子内振動がどのように結合しているのか、明らかにする手法を開拓した。X線構造解析では困難な結晶構造の対称性の崩れを縮退している振動モードの分裂から調べる等、テラヘルツ振動分光の優位性を示してきた。

本年度は、以下の研究を主に行った。

深共晶溶媒(Deep Eutectic Solvent: DES)とは、室温で固体である2種類以上の物質を混合することで共晶を形成し、融点が降下することで室温で液体となる混合物を指す。一般的に水素結合ドナー性の物質と、アクセプター性の物質を混合することで調製可能であり、更に環境親和性が高いため、グリーンソルベントとして注目を集めている。先行研究では、時間分解蛍光分光法等によりDES内に不均質性の存在が確認されている。本研究では誘電分光法により、緩和時間の広がりから動的な不均質性の考察を行った。誘電分光測定では、ベクトルネットワークアナライザとTHz時間領域分光装置を用いて、サブGHzからTHz領域における周波数依存の複素誘電率を測定し、そのスペクトルから分子の運動の解析を行う。293 Kから333 Kまでの温度範囲でスペクトルの

温度変化を調べ、Cole-Cole式: $\varepsilon(\nu) = \Delta\varepsilon / \{1 + (i2\pi\nu\tau)^\beta\} + \varepsilon_\infty$ を用いてフィッティングを行った。ここで $\Delta\varepsilon$ は緩

和強度、 τ は緩和時定数である。この式は、測定した時間スケールにおいて、分子が単一の時定数で表される運動を行うとき $\beta = 1$ のDebye式となるが、 $\beta < 1$ の時、緩和時間に不均一な広がり、つまり動的な不均質性を持つといえる。また、DES中におけるヒドロキシ基周辺の溶媒環境を調べるため、FTIR測定を行った。2400 cm^{-1} ~ 2800 cm^{-1} の範囲において、ラウリン酸単体と同じ形状のOH伸縮振動バンドを示し、ラウリン酸はDES中においても主に二量体として存在していることが分かった。

水溶液中のポリ(*N*-イソプロピルアクリルアミド) (PNiPA) やポリ(*N,N*-ジエチルアクリルアミド) (PdEA) は、温度

上昇とともに親水性のコイル状態から疎水性のグロビュール状態へと構造変化を起こす。この転移はコイルからグロビュールへの転移と呼ばれ、疎水性アルキル基と親水性アミド基の水和状態が影響している。しかし、この転移機構の詳細については、まだ十分に解明されていない。本研究では、溶質近傍の水の水の微視的な特性に関する情報を得るために、マイクロ波から中赤外領域にかけての分光測定を行った。PdEAとそのモノマーであるN,N-ジエチルプロピオンアミド(dEP)の溶液をベクトルネットワークアナライザーによる誘電緩和測定(100 MHz - 20 GHz)とTHz時間領域分光法(0.3 THz - 2.7 THz)によって調べた。溶液の複素誘電率スペクトルから水和構造の温度依存性を調べた。HOD/D₂O溶液中のPdEAとそのモノマーdEPを赤外分光法で調べ、溶質のCH伸縮バンドと溶媒のOH伸縮バンドから水和状態の温度依存性を観測した。誘電率測定では、3つのデバイ緩和成分と1つの振動成分によるモデル関数が複素誘電率スペクトルをよく説明することがわかった。緩和時間 τ は、それぞれ約100 ps, 10 ps, 0.1 psである。このモデル関数は、最も遅い緩和成分を除いて、純水の複素誘電率スペクトルの式と類似している。これは、最も遅い成分が溶質と強く相互作用する水の水を表し、他の2項が溶質と相互作用しないバルク状の水(バルク水)を表していることを示している。また、溶質の繰り返し単位あたりの水の水の数(水和数)は、誘電強度から見積もることができる。PdEAの水和数は転移温度まで温度を上げると急激に減少するが、dEPの値に大きな変化は見られない。この結果は、温度を上げるとポリマーが転移温度近傍で脱水するという分子的描像と一致する。

【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Slow Spectral Diffusion of the NO Stretching Mode of [RuCl₅(NO)]²⁻ in D₂O Studied by 2D-IR Spectroscopy and Molecular Dynamics Simulations Yuki Fujii, Kyoko Aikawa, Jumpei Tayama, Motohiro Banno, Kaoru Ohta and Keisuke Tominaga *J. Chem. Phys.* 158 (13) 134510 2023 2023.8.21 英語 有 研究論文(学術雑誌)
2. Multiple evidences for molecular level heterogeneity in a non-ionic biocatalytic deep eutectic solvent Tanmoy Khan, Ejaj Tarif, Yuto Awano, Lou Serafin Lozada, Nilimesh Das, Keisuke Tominaga, Pratik Sen *J. Mol. Liq.* 122882, 389 (2023) 2023.8.21 英語 有 研究論文(学術雑誌)
3. Where do the Fluorine Atoms Go in Inorganic-Oxide Fluorinations? A Fluorooxoborate Illustration under Terahertz Light Chunjie Shen, Feng Zhang, Tetsuo Sasaki, Chaolu Eerdun, Michitoshi Hayashi, Houn-wei Wang, Keisuke Tominaga, Miriding Mutailipu, Shilie Pan *Angew. Chem. Int. Ed.* 63, e202319121 2024.2.12 英語 有 研究論文(学術雑誌)

[12] 秋本 誠志

課題: 光合成系における励起エネルギー緩和の観測と機能解明

研究テーマ: 光合成色素タンパク質複合体における電子移動・エネルギー移動と環境応答

主にピコ秒時間分解蛍光分光法を用い、光合成初期過程の環境応答について光合成生物の進化や地球環境の変化の観点から研究を進めている。本年度は昨年度に引き続き、シアノバクテリア *Acaryochloris marina*、灰色藻 *Cyanophora paradoxa*、ユーグレナ藻 *Euglena gracilis* の培養光質応答について、特に様々な光環境下で光化学系Iと光化学系IIの間でどのようにエネルギーを配分するかについて精査した。灰色藻 *C. paradoxa* はシアノバクテリアや紅藻と同じ色素組成を持つものの、光環境応答については色素組成の異なる緑藻と同様の挙動を示すことがわかった。ユーグレナ藻 *E. gracilis* の光環境応答も緑藻と同様であったが、この結果について

はユーグレナ藻が緑藻を共生体とする二次共生で生まれたと考えれば理解できる。さらに、シアノバクテリア *Synechococcus leopoliensis*、灰色藻 *C. paradoxa*、緑藻 *Chlorella variabilis* について、鉄イオン濃度が光合成初期過程に与える影響を調べている。

陸上植物 *Taxus cuspidata* は氷点下でもクロロフィルを保持しながら光障害を最小限に抑えることができる。このメカニズムの詳細を明らかにするために、夏・冬の強光・弱光下にある葉(合計4条件)からチラコイド膜を精製し、エネルギー移動・消光過程をピコ秒時間分解蛍光分光法により測定した。冬の葉では、光捕集アンテナタンパク質LHC(Light-Harvesting Chlorophyll-binding complex)で励起エネルギーの消光が起きていることがわかった。

珪藻 *Cheetoceros gracilis* の光化学系の周辺部には数多くの光捕集アンテナタンパク質FCP (Fucoxanthin Chlorophyll a/c-binding Protein)が存在するが、個々の機能は不明である。様々なFCP欠損株のエネルギー移動・消光過程を測定し、個々のFCPの機能について解明を進めている。

研究テーマ:時間分解蛍光分光法の開発

昨年度より、時間分解蛍光スペクトルの測定システムや解析方法について改良を行ってきた。現在のところ、測定時間を従来の5分の1程度にまで短縮すること、これまで2段階で解析していたところを1段階で解析し精度を上げることに成功している。様々な光合成系の測定・解析を行い、最適化していく段階にある。

【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Long-term light adaptation of light-harvesting and energy-transfer processes in the glaucophyte *Cyanophora paradoxa* under different light conditions Yoshifumi Ueno, Seiji Akimoto 筆頭著者 May-23 Photosynthesis Research 159 2-3 165- 175 英語 有 研究論文(学術雑誌)

【MISC】※下記の順で記載

タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Diversity of responses to different light conditions in excitation energy transfer of cyanobacteria Seiji Akimoto Proceedings of the 17th DAE-BRANS Biennial Trombay Symposium on Radiation & Photochemistry (ISBN 978-81-957780-9-6) Jan-24 英語 無

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. 鉄濃度が緑藻 *Chlorella variabilis* の光合成初期過程に与える影響 - 分光学的手法による調査 - 酒井 希, 藍川 晋平, 秋本 誠志 光合成セミナー2023 2023年6月 日本語 ポスター発表 名古屋工業大学 国内
2. サブマイクロ秒領域における光合成系の時間分解測定 古谷 実祐, 秋本 誠志 光合成セミナー2023 2023年6月 日本語 ポスター発表 名古屋工業大学 国内
3. 遅延蛍光測定による光化学系の光質応答に関する考察 光合成セミナー2023 2023年6月 日本語 口頭発表(一般) 名古屋工業大学 国内
4. 時間分解分光法による灰色藻 *Cyanophora paradoxa* の光合成初期過程に対する鉄環境の影響の調査 酒井 希, 古谷 実祐, 植野 嘉文, 藍川 晋平, 秋本 誠志 第17回分子科学討論会 2023年9月 日本語 ポスター発表 大阪大学 国内

5. 行列計算を用いた励起エネルギー移動の解析 ～光合成色素タンパク質の機能解明

古谷 実祐,植野 嘉文,沈 建仁,長尾 遼,秋本 誠志 第12回サイエンスフロンティア研究発表会 2023年10月 日本語 ポスター発表 神戸大学 国内

6. クロレラの光合成初期過程に鉄イオン濃度が与える影響 酒井 希,藍川 晋平,秋本 誠志 第3回先端バイオ工学研究センター成果発表会 2023年10月 日本語 ポスター発表 神戸大学 国内

7. クロロフィルc の電子励起状態に関する考察 水村 景太,鞆 達也,秋本 誠志 若手フロンティア研究会2023 2023年12月 日本語 ポスター発表 神戸大学 国内

8. Diversity of responses to different light conditions in excitation energy transfer of cyanobacteria

S. Akimoto Trombay Symposium on Radiation and Photochemistry (TSRP-2024) 2024年1月 英語 口頭発表(招待) DAEコンベンションセンター 国際

9. Comparison of energy transfer processes between two *Acaryochloris marina* strains in response to different light qualities Zhe Wang, Miyu Furutani, Ryo Nagao, Y. Oshifumi Ueno, Reona Toyofuku, Tatsuya Tomo, Seiji Akimoto 第65回日本植物生理学会年会 2024年3月 日本語 ポスター発表 神戸国際会議場 国内

10. マイクロ秒領域における光合成系の励起緩和過程 古谷 実祐,秋本 誠志 第65回日本植物生理学会年会 2024年3月 日本語 ポスター発表 神戸国際会議場 国内

11. 鉄欠乏/過剰条件が緑藻の光合成初期過程に与える影響のグローバル解析による評価, 酒井 希,古谷 実祐,藍川 晋平,秋本 誠志 第65回日本植物生理学会年会 2024年3月 日本語 ポスター発表 神戸国際会議場 国内

12. 光化学系 I の低エネルギークロロフィルによる消光 秋本 誠志,松坂 紘斗,古谷 実祐,長尾 遼,松永 恭子,鞆 達也 第65回日本植物生理学会年会 2024年3月 日本語 口頭発表(一般) 神戸国際会議場 国内

13. Unique adaptation for oxygenic photosynthesis under far-red light in a freshwater eukaryotic alga *Neochloris* sp. Biwa 5-2 (Sphaeropleales, Chlorophyceae) Wang Fei, Akimoto Seiji, Miyashita Hideaki 日本藻類学会第48回大会 2024年3月 神戸大学 国内

【受賞】※下記の順で記載

賞名称 受賞者 受賞対象 授与機関名 受賞区分 受賞年月 国内国外区分

1. 第12回サイエンスフロンティア研究発表会優秀発表賞 古谷 実祐,植野 嘉文,沈 建仁,長尾 遼,秋本 誠志 行列計算を用いた励起エネルギー移動の解析 ～光合成色素タンパク質の機能解明 神戸大学理学研究科 2023年10月 国内

3. 有機化学講座

3-1. 有機反応化学

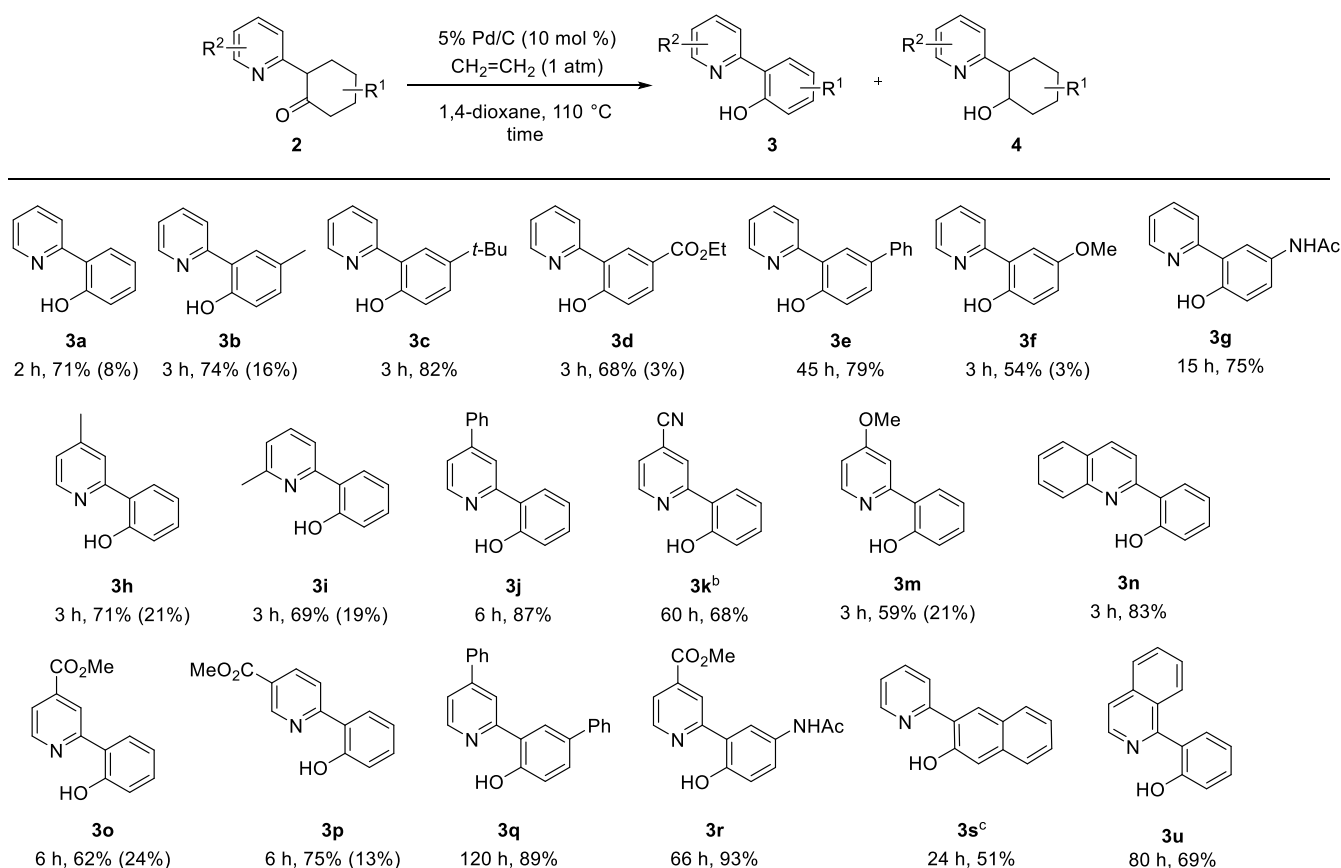
[13] 林 昌彦

Synthesis of 2-(pyridin-2-yl)phenols and 2-(pyridin-2-yl)anilines

2-(Pyridin-2-yl)phenols and 2-(pyridin-2-yl)anilines serve as crucial molecular structures in a diverse array of compounds. These include inhibitors targeting KRASG12C (AMG 510) used in the treatment of solid tumors, along with various anti-inflammatory agents, and as ligands in metal complex formations.

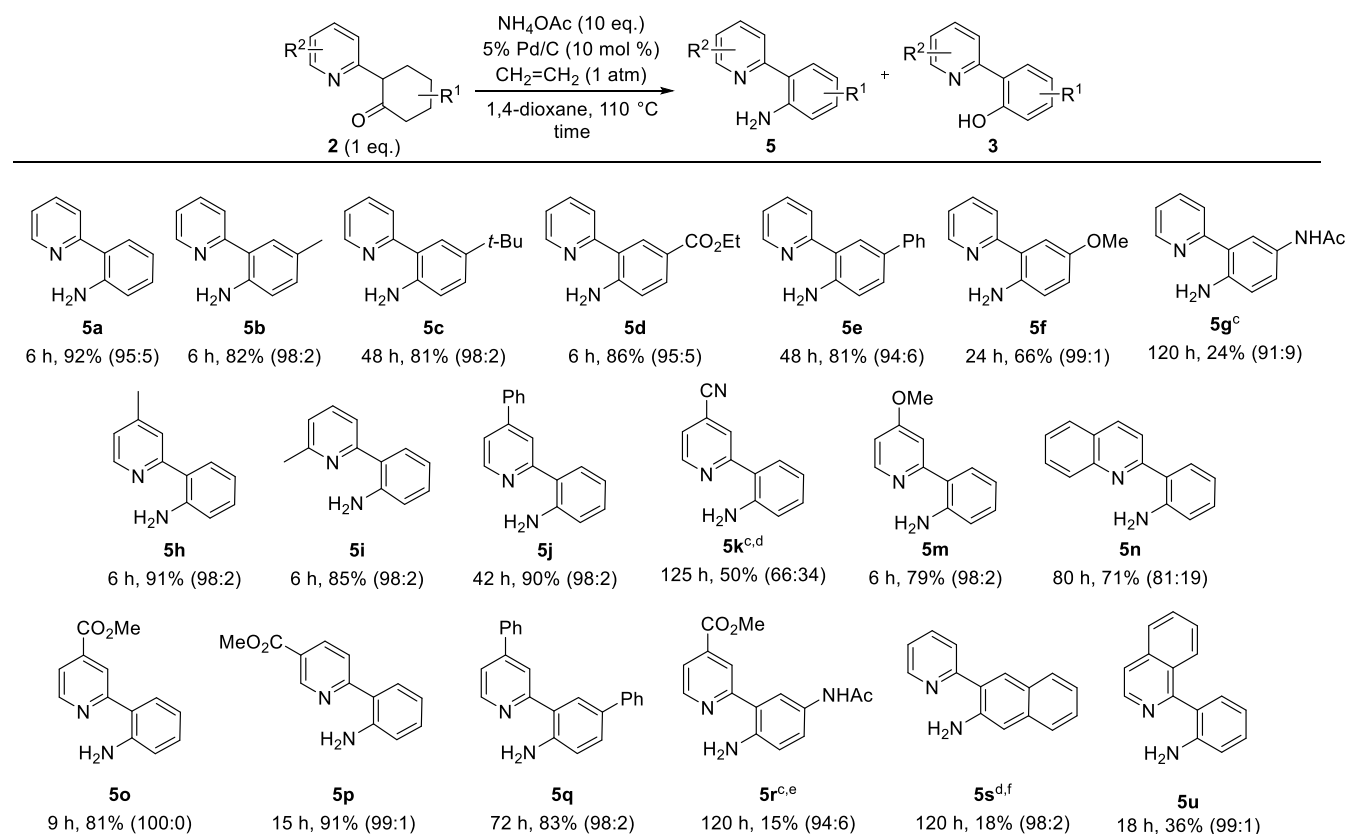
We report the novel and efficient synthesis of 2-(pyridin-2-yl)phenols and 2-(pyridin-2-yl)anilines starting from 2-(pyridin-2-yl)cyclohexan-1-ones in the absence or presence of a nitrogen source, respectively, using the Pd/C_ethylene system. We first explored the synthesis of 2-(pyridin-2-yl)phenols. After meticulous examination of various conditions including solvent and reaction temperature, we found the ideal conditions were 1,4-dioxane as the solvent and a temperature of 110 °C. The outcomes under the optimized conditions are shown in Scheme1. The reaction proceeded smoothly to produce 2-(pyridin-2-yl)phenols in good to high yield (51__87% yield). A variety of functionalized groups such as alkyl, aryl, alkoxy, ester, amide, and nitrile¹⁷ were tolerated in this reaction.

Scheme 1. Synthesis of 2-(pyridin-2-yl)phenols^a



Next, we examined the reaction of 2-(pyridin-2-yl)cyclohexan-1-ones (2) with ammonium acetate in the presence of 5% Pd/C (10 mol %) under ethylene atmosphere to afford 2-(pyridin-2-yl)anilines (5). The obtained results are summarized in Scheme 2. Most reactions took place smoothly to produce desired product 5 in good to high yields accompanied by a small amount of 2-(pyridin-2-yl)phenols.

Scheme 2. Synthesis of 2-(pyridin-2-yl)anilines^{a,b}



【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Synthesis of 2-(pyridin-2-yl)phenols and 2-(pyridin-2-yl)anilines

Keigo Miki, Katsumi Maeda, Ryosuke Matsubara and Masahiko Hayashi, J. Org. Chem. 89巻 5797—5810、2024年4月 英語 有 研究論文(学術雑誌)

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. “Syntheses of Boraindene Derivatives“, Suguru Murakami, Ryosuke Matsubara, Masahiko Hayashi

第 69 回有機金属化学討論会 大阪大学 2023.9.13-15 ポスター発表 国内

[14] 松原 亮介

当研究室では昨年度、遷移金属を用いることなく二酸化炭素をギ酸塩へと還元する光反応を開発した。この反応においていくつかの懸念点があった。一つは光増感剤の吸収波長が短く、可視光領域短波長側ぎりぎりであること、もう一つはアスコルビン酸を犠牲還元剤として用いている点である。今年度はそれぞれの課題に対して

解決を目指す研究を行った。

課題1: 光増感剤吸収波長の長波長化を目指す分子構造設計

我々は高い還元力を有する光増感剤の開発に注力している。これまでに、3,6 位にアミノ基を有するカルバゾールが可視光吸収を有し、かつ非常に高い還元力を有することを明らかにしていた。光励起状態の還元電位は -2.7 V vs SCE 程度であり、CO₂ の還元電位 -2.2 V vs SCE を優に下回るため、CO₂ の還元も可能である。しかしながら、これまで用いていた 3,6 ジメチルアミノカルバゾールの吸収波長先端は 430 nm 付近であり、太陽光の可視光領域 (400-700 nm) の大部分を使用できないという課題があった。そこで、還元力を大きく損なうことなく分子設計を工夫することにより吸収波長の長波長化を目指した。

結果として、ナフタレンの 1,4 位にそれぞれ 3,6-ジメチルアミノカルバゾールを置換させた分子が、高い還元力を維持しつつ 470 nm まで吸収波長を有することが分かった。ナフタレンの 1 位に一つだけの 3,6-ジメチルアミノカルバゾールを置換させた分子はそのような長波長シフトは見られないため、ナフタレンに二つの 3,6-ジメチルアミノカルバゾールを置換させることが重要であることがわかった。また、ナフタレンではなくベンゼンの 1,4 位にそれぞれ 3,6-ジメチルアミノカルバゾールを置換させた分子も合成したが、この分子も長波長シフトは見られなかった。この長波長シフトがなぜ起こったのかを計算科学と実験科学を用いて明らかにした。

得られた新規光増感剤を用いて高難度還元反応を行ったところ、480 nm を中心波長に持つ LED ランプを用いても反応が進行することを確認した。すなわち、高い還元力を保ちつつ長波長の光で光反応を進行させるひかり増感剤であることが分かった。

課題2. アスコルビン酸を用いない CO₂ 光還元反応の開発

我々が開発した CO₂ 光還元反応では、還元剤としてアスコルビン酸(ビタミン C)を用いていた。地球規模での実用化を目指すうえでアスコルビン酸は適切ではないため、他の還元剤の利用を検討することとした。還元剤は自身が酸化されて、反応後に酸化体へと変化する。そこで、酸化されることで有用化合物を与える分子を CO₂ 光還元反応における還元剤として用いれば、CO₂ 還元体としてギ酸を得ると同時に有用な酸化体化合物も得られるため実用化に耐えうる反応になると考えた。

今回はその概念実証のため、アスコルビン酸の代わりに種々の電子豊富な分子(すなわち酸化されやすい分子)を用いて CO₂ 光還元反応を検討した。その結果、トリフェニルホスフィンのような 3 価のリン化合物がアスコルビン酸に代替する電子源となることが分かった。アスコルビン酸の場合と異なり塩基性条件が必須ではなく中性条件でも反応が進行するため、生成物としてギ酸塩ではなくギ酸を直接得ることができた。

【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. One-Pot Synthesis of 3-Substituted Indoles from 2-(2-Nitro-1-phenylethyl)cyclohexanone Derivatives

Yangjin Kuang, Katsumi Maeda, Ryosuke Matsubara, Masahiko Hayashi The Journal of Organic Chemistry 88(9) 5791- 5800 Apr-23 英語 有 研究論文(学術雑誌)

2. Photophysical and electrochemical properties of 9-naphthyl-3,6-diaminocarbazole derivatives and their application as photosensitizers Ryosuke Matsubara, Huilong Kuang, Tatsushi Yabuta, Weibin Xie, Masahiko Hayashi, Eri Sakuda 筆頭・責任著者 Journal of Photochemistry and Photobiology 15 100176- 100176 Jun-23 英語 有 研究論文(学術雑誌)

3. Sensitizer-Free Photochemical Regeneration of Benzimidazoline Organohydride Ryosuke Matsubara,Tatsuhiro Harada,Weibin Xie,Tatsushi Yabuta,Jiasheng Xu,Masahiko Hayashi 筆頭・責任著者 The Journal of Organic Chemistry 88(17) 12276- 12288 Aug-23 英語 有 研究論文(学術雑誌)

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. Ultrafast Intramolecular Charge Transfer Dynamics of 9-Arylcarbazole in Organic Solvents by Using Empirical Stochastic Model TAKAMOTO Kazuya,UENO Yoshifumi,OHTA Kaoru,HAYASHI Michitoshi,AKIMOTO Seiji,MATSUBARA Ryosuke,TOMINAGA Keisuke 38th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics 2023 年 6 月 英語 ポスター発表 福岡 国際
2. 遷移金属を用いない CO₂ 光還元反応 松原亮介 第 98 回触媒化学融合研究センター講演会 2023 年 8 月 日本語 口頭発表(招待) つくば 国内
3. CO₂ 光還元反応の開発と動的エキシトン効果を考慮した今後の計画 松原亮介 5. 第 18 回動的エキシトンセミナー 2023 年 8 月 日本語 口頭発表(招待) オンライン 国内
4. 有機ヒドリドの系内再生を用いた遷移金属フリーの CO₂ 光還元反応の開発 松原 亮介,謝 衛斌,小堀 康博,山中 正浩 2023 年光化学討論会 2023 年 9 月 日本語 口頭発表(一般) 広島 国内
5. Syntheses of Boraindene Derivatives Suguru Murakami,Ryosuke Matsubara,Masahiko Hayashi 第 69 回有機金属化学討論会 2023 年 9 月 日本語 口頭発表(一般) 大阪大学 国内
6. Transition metal-free photochemical CO₂ reduction Ryosuke Matsubara 5th International Symposium on Catalysis Toward Green Sustainable Chemistry (CAT-GSC-5) 2023 年 9 月 英語 口頭発表(招待) Tokyo 国際
7. 高難度光還元反応を実現するカルバゾール光増感剤の開発と機能展開 松原 亮介 第21回有機合成化学協会関西支部賞受賞講演会 2023 年 10 月 日本語 口頭発表(招待) 大阪 国内
8. カルバゾールを基盤とした有機色素の開発と光増感剤としての利用 松原亮介 近畿化学協会機能性色素部会第 111 回例会 2024 年 1 月 日本語 口頭発表(招待) 大阪 国内

【受賞】※下記の順で記載

賞名称 受賞者 受賞対象 授与機関名 受賞区分 受賞年月 国内国外区分

1. 第 21 回有機合成化学協会関西支部賞 松原亮介 高難度光還元反応を実現するカルバゾール光増感剤の開発と機能展開 有機合成化学協会関西支部 国内学会・会議・シンポジウム等の賞 2023 年 8 月 国内
2. 令和 5 年度前期全学共通教育ベストティーチャー賞 松原 亮介 基礎有機化学 1,2 神戸大学 その他 2023 年 10 月 国内

3-2. 生命分子化学

[15] 田村 厚夫

課題:ペプチド分子およびその集合体の人工デザイン

「人工設計したペプチド」を用いて、自在に「ナノ構造や機能をデザイン」する機能性ペプチドデザイン研究を進めている。これによって設計したペプチド分子およびそのナノ集合体を用いて、基礎科学の発展への寄与に

加え、現代社会が抱える高齢化社会での医療や環境破壊などの諸問題の解決にもつながる新機能を創製することを目指している。本年度行った研究を以下の(1)～(3)に分類して説明する。なお、昨年度から行ってきた耐熱性&液晶性ペプチドナノファイバーについては、詳細をとりまとめ今年度学術論文での発表に至った。

(1) 新型コロナウイルスを不活化するペプチド設計

コロナウイルスは、自らのエンベロープ膜から突き出たスパイクタンパク質(S)を用い、ヒト ACE2 受容体を介して感染する。敢えて受容体結合に関与しない S 後半サブユニットのらせん構造を標的とすることで、変異ウイルスに対しても有効な新たな抗ウイルスペプチドを人工設計することを目指した。この結果、2つの異なる相互作用に基づいてペプチドを設計合成し、S フラグメントと特に強く相互作用する4種を見出すことに成功し、その相互作用機構を明らかにした。実際のコロナウイルス(毒性を抑えたスードウイルス)を用いてヒト細胞への感染を調べた所、このペプチドの感染抑制効果が確認できた(学内共同研究)。このことは、ペプチドがコロナウイルスを不活化する医薬品等として有効である可能性を示すものである。

(2) クライオ電顕および固体 NMR によるペプチドナノファイバーの構造解析

ペプチドを設計するに際して、分子を集合させてナノレベル構造体を作成することは、構造の安定化や高機能化に有効である。ここでは、小型ペプチド(アミノ酸数 7～21)で、 α ヘリックス構造、または β シート構造を形成しつつナノファイバーとなる構造体について、最新のクライオ電顕、高度な固体 NMR(核磁気共鳴)、偏光赤外分光測定など、高度な物理化学的手法を駆使し、構造解析を行った。この結果、まず α ヘリックス型ファイバーについて、意外にも β シート様の分子間水素結合生じていることを明らかにし、安定化の機構を説明できることがわかった。一方、 β シート型集合体については、クライオ電顕で美しく積層している姿を明らかにすることができた。

(3) レアメタル結合能を持つ環状および鎖状ペプチドの創製

N 末端と C 末端をペプチド結合つないだ環状ペプチド、および通常の鎖状ペプチドで、レアメタルに選択的結合能を持つものの創製を目指した。目指す機能として、白金族レアメタル、電池材料等として使われるリチウム、コバルト、ニッケル、さらにレアアース(ランタノイド)を対象とした。この結果、ロジウム、ルテニウム、コバルト、テルビウム、ディスプロシウムなどと選択的に結合するペプチドを得ることとなった。以上の結果がレアメタルの結合回収につながれば、資源の少ない我国でも、都市鉱山からレアメタルをリサイクルすることで、経済問題や環境問題の解決につながると考えられる。

【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Hyper Thermostability and Liquid-Crystal-Like Properties of Designed α -Helical Peptide Nanofibers.
Minami Kurokawa, Tomoya Ohtsu, Eri Chatani, Atsuo Tamura The journal of physical chemistry. B 127(39) 8331- 8343
Oct-23 英語 有 研究論文(学術雑誌)
2. Structural Analyses of Designed α -Helix and β -Sheet Peptide Nanofibers Using Solid-State Nuclear Magnetic Resonance and Cryo-Electron Microscopy and Introduction of Structure-Based Metal-Responsive Properties.
Shota Nakagawa, Minami Kurokawa, Ohki Kambara, Toshiaki Takei, Kengo Daidoji, Akira Naito, Mao Takita, Akihiro Kawamoto, Mika Hirose, Atsuo Tamura International journal of molecular sciences 25(2) 1111- 1130 Jan-24 英語 有 研究論文(学術雑誌)

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. アミロイド様線維を形成するジペプチドの構造解析 迫綾香, 齋藤真輝, 枝和男, 田村厚夫 第69回日本生化学会近畿支部例会 2023年5月 日本語 ポスター発表 京都大学 国内
2. 金属結合能を持ったクロス α ヘリカルファイバーを形成するペプチドの設計 山澤千慧, 田村厚夫 第69回日本生化学会近畿支部例会 2023年5月 日本語 ポスター発表 京都大学 国内
3. Structural analysis of artificially designed peptide nanofibers by cryo-electron microscopy Minami Kurokawa, Mika Hirose, Akihiro Kawamoto, Atsuo Tamura The 61st Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan 2023年7月 英語 ポスター発表 名古屋国際会議場 国際
4. 亜鉛イオンとの結合に伴う人工設計ペプチドの二次構造誘起 本多紘, 田村厚夫 第23回日本蛋白質科学会年会 2023年7月 日本語 ポスター発表 名古屋国際会議場 国内
5. 短鎖ペプチドのファイバー形成とその構造解析 迫綾香, 齋藤真輝, 枝和男, 田村厚夫 第12回サイエンスフロンティア研究発表会 2023年10月 日本語 ポスター発表 神戸大学 国内
6. Structural analysis of the self-assembling dipeptide Gly-Phe Ayaka Sako, Masaki Saito, Kazuo Eda, Atsuo Tamura The 60th Japanese Peptide Symposium 2023年11月 英語 ポスター発表 滋賀 国際
7. ジペプチド Gly-Phe 集合体の構造解析 迫綾香, 齋藤真輝, 枝和男, 田村厚夫 若手フロンティア研究会2023 2023年12月 日本語 ポスター発表 神戸大学 国内

【書籍等】※下記の順で記載

タイトル 担当区分 著者名 出版社・発行元 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. 微生物機能を活用したレアメタル・貴金属リサイクル 分担執筆 田村 厚夫, 飯田 禎弘 シーエムシー・リサーチ Mar-24 日本語

[16] 茶谷 絵理

課題: タンパク質の凝集機構の解明

タンパク質は、折りたたみを誤るとアミロイド線維という凝集体を形成し、生体内で沈着する。その結果、アルツハイマー病やプリオン病、ハンチントン病、透析アミロイドーシスのような疾病の発症につながる。

本研究では、アミロイド病を根治し生命活動を健全に維持するための仕組みを化学的に理解し制御することを目指し、アミロイド線維形成機構の解明に取り組んでいる。以下に本年度のおもな研究活動内容を示す。

1. アミロイド線維の核形成機構の解明

アミロイド核が生成するまでの初期段階の追跡と構造解析を行っている。最も単純な理論に基づくと、アミロイド核生成は一段階で進行し、途中で核形成中間体は存在しないと考えられている。しかし実際には、多数のタンパク質で初期凝集体が生成する様子が見られるため、これらのプロセスの詳細と、核形成に対する関与を明確化することを目指している。

今年度は、光散乱によってウシインスリンの核形成中間体の形成プロセスを解析し、得られた会合数と拡散係数の情報に基づいた凝集モデルを完成させた。オリゴマーやプロトフィブリルは、疾病発症に重要に関わる初期

凝集体であるが、本研究により、タンパク質がどのように会合することでオリゴマーとプロトフィブリルが生成するのかを説明する基礎スキームを提案することができた(長浜バイオ大との共同研究)。さらに、 α シヌクレインについて、プロトフィブリル様の初期凝集体が形成するプロセスの追跡を進め、超遠心分析、小角X線散乱解析、透過型電子顕微鏡による解析を進めた(京都大、自治医科大、分野内との共同研究)。また、初期凝集体が直接線維核になるのか、それとも一旦解離してから線維核を形成するのかを実験的に判断するために、FRETを用いた検討にも着手した(分野内との共同研究)。

2. アミロイド線維をシードとした増殖機構の解明

アミロイド線維は、一旦生成するとシードとして機能し、後続のアミロイド線維形成が加速的に進む。この現象はシーディングと呼ばれ、アミロイド線維形成の関わる疾病の進行や感染に関わる。

今年度は、トランスサイレチンのアミロイド線維形成におけるシーディングの関与に注目し研究を進めた。トランスサイレチンは生体内で線維化することによりトランスサイレチンアミロイドーシスを引き起こすが、試験管内ではアミロイド線維形成の再現が難しい。しかし、昨年度までにポリペプチド鎖の一部が欠如するとトランスサイレチンのアミロイド線維化が格段に深奥しやすくなることを見出したので、今年度はその詳細の解明に進んだ。すでに報告されている変異のうちの3種類に注目し本断片に導入を行うと、野生型と異なる線維構造を形成する変異体の存在が明らかとなった。その構造は、シーディングで複製されるだけでなく、野生型にかけ合わせても強く伝播した。このことより、本変異体での病態との紐づけを試みたいと考えている。

これに加え、線維構造を鋭敏に識別する手法開発として、チオフラビンTの蛍光寿命を利用した構造変化を追跡する試みを行っている。今年度は、アミロイド β のアミロイド線維の解析に進展し、本手法を用いると、ペプチド長や反応条件によって生じる線維構造の差異を高い精度で識別できることを確認した(浜松ホトニクス株式会社との共同研究)。

3. タンパク質水溶液の液-液相分離状態に関する研究

近年、タンパク質が細胞内で濃厚な液滴状の集合体を形成することが明らかになり、注目を集めている。この液滴状集合体は生理機能を担う一方で、凝集の生成場ともなり、アミロイド線維形成に関わることも指摘されている。そこで、液滴形成機構ならびに液滴からのアミロイド線維の生成機構に注目し、研究を進めている。

今年度は、主に α シヌクレインとタウの液滴に取り組んだ。ポリエチレングリコールにより液-液相分離状態を試験管内で誘導することにより、液滴の動態の解析を進めたほか(東京工業大、大阪大、鳥取大との共同研究)、 α シヌクレインについては、レーザートラッピングによる時空間的に制御した形成に成功し、一液滴レベルで形成、成長、固化を観測することができた(台湾国立陽明交通大との共同研究)。

また、これまで行ってきた液滴からのアミロイド線維核発生頻度の計測法の構築に共同研究として引き続き参画し、マイクロ流体を用いた手法開発を進めた(東北大との共同研究)。

4. 低分子熱ショックタンパク質によるアミロイド線維形成阻害機構の解明

生体内では、アミロイド線維の形成が未然に防がれている。そこで、それに関わる分子には、分子シャペロンがよく知られるが、その一種である低分子熱ショックタンパク質のアミロイド線維形成阻害の機構解明にも取り組んでいる。

低分子熱ショックタンパク質の一種である α Bクリスタリンがインスリン由来ペプチドの現象について、超遠心分析、小角X線散乱解析、透過型電子顕微鏡による解析を進めたところ、核前駆体に結合しサイズ発達を顕著に抑制することが明らかになった。そこで、複合体中でどのように α Bクリスタリン分子が組み込まれることによって

凝集成長の阻害が成されているのかを明らかにするため、重水素化支援中性子散乱法を用いた解析を開始した(京都大、自治医科大、オーストラリア国立大との共同研究)。また、 α Bクリスタリンが液滴の固化に与える影響についても解析を開始した(オーストラリア国立大との共同研究)。

【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Detection of fibril nucleation in micrometer-sized protein condensates and suppression of Sup35NM fibril nucleation by liquid-liquid phase separation Mao Fukuyama, Suguru Nishinami, Yoko Maruyama, Taiki Ozawa, Shunsuke Tomita, Yumiko Ohhashi, Motohiro Kasuya, Masao Gen, Eri Chatani, Kentaro Shiraki, Akihide Hibara Analytical Chemistry 95(26) 9855- 9862 22-Jun 英語 有 研究論文(学術雑誌)
2. Variations in the Protein Hydration and Hydrogen-Bond Network of Water Molecules Induced by the Changes in the Secondary Structures of Proteins Studied through Near-Infrared Spectroscopy. Mika Ishigaki, Yoshiki Kato, Eri Chatani, Yukihiro Ozaki The journal of physical chemistry. B 127(32) 7111- 7122 17-Aug 英語 有 研究論文(学術雑誌)
3. Hyper Thermostability and Liquid-Crystal-Like Properties of Designed α -Helical Peptide Nanofibers. Minami Kurokawa, Tomoya Ohtsu, Eri Chatani, Atsuo Tamura The journal of physical chemistry. B 127(39) 8331- 8343 5-Oct 英語 有 研究論文(学術雑誌)
4. Oligomerization and aggregation of NAP-22 with several metal ions. Shohei Maekawa, Keisuke Yuzu, Eri Chatani, Kenichi Morigaki Neuroscience letters 821 137623- 137623 31-Jan 英語 有 研究論文(学術雑誌)
5. Mechanistic modeling of amyloid oligomer and protofibril formation in bovine insulin Keisuke Yuzu, Hiroshi Imamura, Takuro Nozaki, Yuki Fujii, Shaymaa Mohamed Mohamed Badawy, Ken Morishima, Aya Okuda, Rintaro Inoue, Masaaki Sugiyama, Eri Chatani 最終・責任著者 Journal of Molecular Biology 436(6) 168461- 168461 15-Mar 英語 有 研究論文(学術雑誌)

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. タウ液滴の凝集に対する酸化還元状態の影響の解析 道上佑希, 益井歩未, 大橋祐美子, 柚佳祐, 山口圭一, 後藤祐児, 河田康志, 茶谷絵理 第23回 日本蛋白質科学会年会 2023年6月 日本語 ポスター発表 名古屋 国内
2. トランスサイレチン 49-127 断片のアミロイド線維形成反応における野生型と変異体の比較 中尾 星哉, 柚 佳祐, 松村 美里, 大橋 祐美子, 茶谷 絵理 第23回 日本蛋白質科学会年会 2023年6月 日本語 ポスター発表 名古屋 国内
3. ドデシル硫酸ナトリウム共存下での α シヌクレイン凝集反応の多様性 北野さくら, 柚佳祐, 笹田航, 木村哲就, 茶谷絵理 第23回 日本蛋白質科学会年会 2023年6月 日本語 ポスター発表 名古屋 国内
4. ウシ由来インスリンのアミロイド核形成に見られるオリゴマーおよびプロトフィブリル形成機構 柚佳祐, 今村比呂志, 野崎拓郎, 藤井悠生, 守島健, 奥田綾, 井上倫太郎, 杉山正明, 茶谷絵理 第23回 日本蛋白質科学会年会 2023年6月 日本語 ポスター発表 名古屋 国内
5. アルファシヌクレイン凝集の長時間測定に向けた水中マイクロ流体デバイスの観察 佐藤安里, 小澤大樹, 柚佳祐, 大橋祐美子, 茶谷絵理, 福山真央 令和5年度 化学系学協会東北大会 2023年9月 日本語 口頭発表(一般) 仙台 国内

6. Optical-force induced spatiotemporal formation of a single liquid-like droplet of α -synuclein and subsequent maturation into amyloid fibrils Keisuke Yuzu, Ching-Yang Lin, Chih-Hao Huang, Po-Wei Yi, PinXun Huang, Hiroshi Masuhara, Eri Chatani 16th International Symposium on Nanomedicine (ISNM2023) 2023 年 11 月 英語 口頭発表 (招待) 大阪 国際
7. ウシ由来インスリンのアミロイドオリゴマーおよびプロトフィブリル形成のモデリング 柚佳祐, 今村比呂志, 野崎拓郎, 藤井悠生, 守島健, 奥田綾, 井上倫太郎, 杉山正明, 茶谷絵理 第 61 回 日本生物物理学会年会 2023 年 11 月 英語 口頭発表 (一般) 名古屋 国内
8. Molecular mechanism of early inhibition of amyloid formation by α B-crystallin 國尾佑貴, 柚佳祐, 山本直樹, 森島健, 奥田綾, 井上倫太郎, 杉山正明, Junna Hayashi, John A. Carve, 茶谷絵理 第 61 回 日本生物物理学会年会 2023 年 11 月 英語 ポスター発表 名古屋 国内
9. タンパク質濃縮相からのアミロイド核生成解析に向けた濃縮相サイズ調節法 小澤大樹, 川上純佳, 佐藤安里, 大橋祐美子, 茶谷絵理, 丸山洋子, 白木賢太郎, 火原彰秀, 福山真央 化学とマイクロ・ナノシステム学会 第 48 回研究会 2023 年 11 月 日本語 口頭発表 (一般) 熊本 国内
10. 酵母プリオンタンパク質の液液相分離がアミロイド核生成に与える影響の評価 福山 真央, 西奈美 卓, 富田 峻介, 大橋 祐美子, 小澤大樹, 玄大雄, 粕谷 素洋, 茶谷 絵理, 丸山洋子, 白木 賢太郎, 火原 彰秀 化学とマイクロ・ナノシステム学会 第 48 回研究会 2023 年 11 月 日本語 熊本 国内
11. 酸化、還元条件下におけるタウ液滴の凝集機構の解明 道上佑希, 大橋裕美子, 益井歩未, 柚佳祐, 山口圭一, 河田康志, 茶谷絵理 神戸大学研究基盤センター 若手フロンティア研究会 2023 2023 年 12 月 日本語 ポスター発表 神戸 国内
12. 酸化条件下におけるタウ液滴の凝集機構の解明 道上佑希, 大橋裕美子, 益井歩未, 柚佳祐, 山口圭一, 河田康志, 茶谷絵理 第 46 回 日本分子生物学会年会 2023 年 12 月 日本語 ポスター発表 神戸 国内
13. 液-液相分離に高い温度感受性をもたらす Sup35 天然変性領域の局所構造 大橋 祐美子, 西奈美 卓, 白木 賢太郎, 茶谷 絵理 第 46 回 日本分子生物学会年会 2023 年 12 月 日本語 口頭発表 (招待) 神戸 国内
14. アミロイド線維の生成場としての液滴の理解 茶谷絵理, 大橋祐美子, 福山真央 第 46 回 日本分子生物学会年会 2023 年 12 月 日本語 口頭発表 (招待) 神戸 国内
15. Optical trapping and single droplet formation of lysozyme at solution surface Yi-Sian Chien, Po-Wei Yi, Ching-Yang Lin, Shuichi Toyouchi, Keisuke Yuzu, Eri Chatani, Hiroshi Masuhara 第 71 回 応用物理学会 春季学術講演会 2024 年 3 月 英語 口頭発表 (一般) 東京 国内

【受賞】※下記の順で記載

賞名称 受賞者 受賞対象 授与機関名 受賞区分 受賞年月 国内国外区分

1. 第 61 回日本生物物理学会 学生発表賞 柚 佳祐, 茶谷 G ウシ由来インスリンのアミロイドオリゴマーおよびプロトフィブリル形成のモデリング 日本生物物理学会 2023 年 11 月 国内

[17] 木村 哲就

タンパク質の機能発現機構・構造形成機構の化学的理解

代謝や成長、学習といった高次の生命現象について階層分けして、紐解いていくと、低次に位置する生体分子

が起こす化学反応が連動・協奏・相互作用することによって起きている。そのため、高次の生体反応の究極的な理解は生体分子の反応機構の解明なくしては不可能である。当グループは化学状態変化や構造変化といった生体分子のダイナミクスを『実時間で』観察し、反応中間体や遷移状態の化学情報および構造情報を明らかにする研究を展開している。

(1) ABC トランスポーターの輸送機構の解明

タンパク質分子、あるいはドメインと呼ばれる分子部分が発現する固有の機能や情報が「連動」・「協奏」・「相互作用」することで、『生体分子システム』が構築されている。ABC (ATP-binding cassette; ATP 結合ドメインを持った) トランスポーターは ATP の結合・加水分解を利用することで、小分子の輸送を行う膜タンパク質であり、種々の化学反応の共役と、構造変化の連動によって輸送が実現される、生体分子システムの代表例である。X 線結晶構造解析から、ABC トランスポーターは小分子の輸送経路を形成する疎水的な 2 つの膜貫通ドメイン(TMD)と、ATP の結合・加水分解を行い、細胞に露出した 2 つのヌクレオチド結合ドメイン(NBD; ATP 分解ドメインとも呼ばれる)から構成されていることがわかっている。さらに、ペリプラズムタンパク質(PP)と呼ばれる水溶性タンパク質が TMD のペリプラズム側と結合し、輸送基質を ABC トランスポーターへと運びこむと考えられている。これらの結晶構造は、細胞の外側に開いた状態と細胞質側に開いた 2 つの異なる状態をとっていることから、PP との結合および ATP の結合・加水分解反応と共役する形で、小分子の輸送が起こるだろうという仮説が提案されてきた。しかし、X 線結晶構造解析で得られる構造はスナップショットであり、『ABC トランスポート』という高次機能の発現機構を明らかにするためには、反応の時間軸に沿ったダイナミクスを直接観察することが必要であると考えられる。特に、

- (i) 輸送基質の取り込み・輸送、ABC トランスポーターのコンフォメーション変化、ATP の結合・加水分解反応、PP と ABC トランスポーターの離合・集散が同期しているか？
- (ii) NBD の ATP 結合/加水分解に伴う構造変化と TMD の構造変化がどのように連動しているか？

といった疑問に答えるには、それぞれのダイナミクスを直接観察し、どのタイミングで、どの分子部分で、どの化学反応が起こっているかを反応軸にそって解析する必要がある。そこで、種々の分光装置(可視吸収、蛍光、蛍光寿命、赤外)を構築・利用し、マイクロ流路デバイスを組み込むことで、ABC トランスポーターを含む膜タンパク質に適用可能な時間分解計測系を開発した。

今年度は、ヘムを輸送基質とする ABC トランスポーター BhuUV および BhuUV にヘムを受け渡すペリプラズムタンパク質 BhuT の複合体形成がヘムの獲得を効率的にしていることを紫外/可視吸収文工法を用いて、精密な滴定実験を行うことによって初めて明らかにした。また、BhuUV の膜貫通ドメインについて、細胞質側とペリプラズム側それぞれに蛍光ラベルを導入し、ヘムと結合した BhuT を加えることで複合体形成時のヘムの位置について特定することを試みた。その結果、ペリプラズム側に結合した BhuT からヘムが放出され、そのヘムはペリプラズム側に近い位置に結合していることが示唆された。

また、輸送を行うためには BhuUV のコンフォメーション変化が必要であるというのが一般的な ABC トランスポーターの反応機構から推測されるが、どの ABC トランスポーターの反応過程に関しても推測の域を出ていない。そこで、小堀教授(分子フォトサイエンスセンター)との共同研究により、スピンラベル ESR 測定を用いることで、反応過程における構造を決定する試みを継続して行なった。スピンラベル化タンパク質を高純度・高効率で調製する方法の構築を進め、スピン共鳴が起こることを確認した。また、膜貫通ドメインに 5 つの異なる位置にシステイン変異を導入し、それぞれ調製しスピンラベルを施した上で、ATP, AMP-PNP, ホロ型 BhuT 等の共存下での CW-ESR を行い、段階的な反応過程における構造変化についての知見を得た。本結果に関しては、国際学会において 2 件の招待講演を行い、加えて日本蛋白質科学会、日本生化学会大会、日本生物物理学会年会

において各 1 件のポスター発表を行なった。

(2) 汎用性の高い時間分解 X 線結晶構造解析法の構築と相補的時間分解分光測定法の開発

原子レベルでのタンパク質の動的構造変化を可視化するために、SACLA における時間分解 X 線結晶構造解析実験(科学技術振興機構 X 線自由電子レーザー施設重点戦略課題推進事業「創薬ターゲットタンパク質の迅速構造解析法の開発」および「無損傷・動的結晶構造解析による生体エネルギー変換過程の可視化」)に参画し、光励起系の構築を推進してきた。この光励起系を利用して、2021 年度には光合成系 II の中間体 S2 から S3 への変化を明らかにし、論文として報告した。また、2019 年度より参画する新学術領域研究課題「高速分子動画法によるタンパク質非平衡状態構造解析と分子制御への応用」の計画研究(分担)として、京大・和歌山県立医科大との共同研究を開始し、カルシウム結合発光タンパク質イクオリンの発光・消光過程を溶液および微結晶での蛍光強度変化を分光学的に追跡し、SACLA での時分割実験に必要な反応速度定数の解析を行ったことに引き続き、2023 年度はストップフローによる発光過程の追跡と速度論的解析および ITC によるカルシウム結合の熱力学的解析を進め、カルシウム結合の分子機構を相補的に検討した。本結果に関しては、国際学会において 3 件の招待講演を行い、加えて国内学会・研究会において合計 6 件のポスター発表を行なった。

(3) 鉄誘引性細胞死に関わる CYB561D2 の鉄還元反応機構の解析

癌抑制遺伝子として同定された 101F6 は Cytochrome *b*₅₆₁ ファミリーに属する膜タンパク質 CYB561D2 を発現し、内分泌小胞膜に存在する。CYB561D2 は 2 つの *b*-type ヘムをもち、細胞質側のヘム *b*_h がアスコルビン酸から電子を受け取り、小胞内側のヘム *b*_l へと電子伝達し、鉄結合サイトで鉄還元を行うことが明らかとされている。一方で、CYB561D2 を発現させた細胞では、鉄過剰かつ酸素存在下において、“フェロトーシス (Ferroptosis)” と呼ばれる脂質過酸化による細胞死が起きている可能性が示唆されている。そこで、CYB561D2 を不飽和脂肪酸で構成されるナノディスクに再構成し、還元型 CYB561D2 からの電子移動によって、ナノディスクを構成する脂質が過酸化されるかどうかを検討することを試みている。

2023 年度には CYB561D2 の大腸菌での発現系の構築を行い、融合タンパク質とすることで安定的な発現が見込める事を見出した。今後はより詳細な速度論的実験を行い、鉄イオンや、酸素の存在・非存在下での過酸化を検討し、CYB561D2 による Ferroptosis 誘引の分子機構を明らかにする。

【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. Oxygen-evolving photosystem II structures during S1-S2-S3 transitions. Hongjie Li, Yoshiki Nakajima, Eriko Nango, Shigeki Owada, Daichi Yamada, Kana Hashimoto, Fangjia Luo, Rie Tanaka, Fusamichi Akita, Koji Kato, Jungmin Kang, Yasunori Saitoh, Shunpei Kishi, Huaxin Yu, Naoki Matsubara, Hajime Fujii, Michihiro Sugahara, Mamoru Suzuki, Tetsuya Masuda, Tetsunari Kimura, Tran Nguyen Thao, Shinichiro Yonekura, Long-Jiang Yu, Takehiko Tosha, Kensuke Tono, Yasumasa Joti, Takaki Hatsui, Makina Yabashi, Minoru Kubo, So Iwata, Hiroshi Isobe, Kizashi Yamaguchi, Michihiro Suga, Jian-Ren Shen Nature 626(7999) 670- 677 Feb-24 英語 無 研究論文 (学術雑誌)

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 講演者 会議名 発表年月 発表言語 発表形態 開催地 国内・国際区分

1. Thermodynamic and kinetic analyses of interaction between aequorin and Ca²⁺ 木村哲就, 大崎優香, 黒木麗, 船橋俊

- 也,中津亨 新学術領域研究「高速分子動画」領域セミナー 2023年5月 英語 ポスター発表 理研・横浜 国内
2. Thermodynamic and kinetic analyses of chemical luminescence induced by the Ca^{2+} binding to Aequorin
Urara Kuroki,Yuka Osaki,Toshiya Funahashi,Toru Nakatsu,Tetsunari Kimura 第23回日本蛋白質科学会年会 2023年7月 英語 ポスター発表 名古屋国際会議場 国内
3. Time-resolved spectroscopy of heme transport in ABC transporter; BhuUV-T Akiho Hara,Yoshitsugu Shiro,Hiroshi Sugimoto,Tetsunari Kimura 第23回日本蛋白質科学会年会 2023年7月 英語 ポスター発表 名古屋国際会議場 国内
4. Time-resolved Measurements for Structural and Functional Dynamics of Membrane Protein Complexes
Tetsunari Kimura,Ayaka Naka,Akiho Hara,Yoshitsugu Shiro,Hiroshi Sugimoto 9IDMRCS 2023年8月 英語 口頭発表 (招待) 幕張メッセ国際会議場 国際
5. Development of microfluidic mixers for time-resolved SFX and spectroscopy and their applications
Tetsunari KIMURA UK/Japan meeting and workshop “Dynamic Crystallography-XFELs and Synchrotrons to study enzyme reactions” 2023年9月 英語 口頭発表(招待) University of Lancaster 国際
6. 鉄還元機能を持つ6回膜貫通型タンパク質101F6の大腸菌での発現と機能解析 阪口 智哉,澤井 仁美,城 宜嗣,鏑木 基成,當舎 武彦,木村 哲就,杉本 宏 第96回日本生化学会大会 2023年11月 日本語 ポスター発表 福岡国際会議場 国内
7. 蛍光タンパク質イクオリンとカルシウムの結合に関する熱力学的解析 黒木麗,大崎優香,船橋俊也,中津亨,木村哲就 第96回日本生化学会大会 2023年11月 日本語 ポスター発表 福岡国際会議場 国内
8. 分光学的手法を用いたABCトランスポーター BhuUV-Tにおけるヘム輸送の機構解明 原明穂,城宜嗣,杉本宏,木村哲就 第96回日本生化学会大会 2023年11月 日本語 ポスター発表 福岡国際会議場 国内
9. Spectroscopic analysis of BhuUV-T reconstituted with amphiphilic polymers Yuki Sumida,Ayaka Naka,Yasuhiro Kobori,Yoshitsugu Shiro,Hiroshi Sugimoto,Tetsunari Kimura 第61回日本生物物理学会年会 2023年11月 英語 ポスター発表 名古屋国際会議場 国内

3-3. 有機分子機能化学

[18] 津田 明彦

光オン・デマンド合成による高機能・高付加価値材料の創製 (神戸大)

ホスゲン是有機合成における重要な C1 ビルディングブロックである一方で、高い毒性を持つことから、その製造および使用は、法的に厳しく監視・管理されている。工業的有用性が高く、世界で年間 8~9 百万トンが生産され、消費されている。大部分のホスゲンは、それを必要とする場所で、必要な時に、必要な量だけオン・デマンド製造されている。当研究グループは、従来法とは全く異なった新たな方法として、クロロホルム(CHCl_3)と酸素から、ホスゲンの光オン・デマンド合成法の開発に成功した(特許第 5900920 号)。本反応は、従来のホスゲンをを用いるほとんどの反応に適用することが可能であり、極めて工業的利用価値が高い。当グループは、当該反応を基礎として、新たな化学反応と、高機能・高付加価値材料の開発に取り組んでいる。当グループから生み出される化学と技術は、学術的にも工業的にも極めて価値が高く、有機合成に革新的イノベーションを生み出すことが期待されている。

上で開発した「光オン・デマンド合成法」は、アルコールやアミン、塩基触媒、水などが共存していても反応が進行し、反応基質を含んだハロメタン溶液に光を照射するだけで、in situ で目的物を得ることができる。我々は複

数の国内化学系企業と協力し、クロロホルムやテトラクロロエチレンなどのハロメタンやハロカーボンを原料として、ポリウレタン、ポリカーボネート、ウレア、イソシアネート、アルデヒド、カルボン酸塩化物、アミノ酸-N-カルボン酸無水物、N-置換トリハロアセトアミドなど、有用な機能性ポリマーや化学薬品類を安全・安価・簡単・低環境負荷・任意スケールで得る反応(技術)開発に成功した。さらにメタンを原料とする光オンデマンド・ホスゲン化反応の開発に成功した。2 件の新規特許出願と 5 件の国際特許出願(+台湾出願)を行った。国内および国外のそれぞれの審査プロセスを経て計 16 件の特許を取得した。また関連する 6 件の論文発表を行った。従来法よりも格段に安全性が高く、簡単であり、高価な設備が不要、原料は溶媒のハロメタンであることから低コストであり、実験室レベルでも工業レベルでも大きなメリットがある。これらの研究成果は社会から注目されており、国内外の多くのメディアで報じられた(神戸大プレスリリース × 4, 化学工業日報, 日刊工業新聞, ニュースイッチ, YAHOO ニュース, コンバーテック, CHEMICAL ENGINEERING, CHEMISTRY WORLD, CHEMICAL PROCESSING, Advance in Engineering, 他国内・国外ソーシャルメディア多数)。今後、日本の化学産業の発展に大きく貢献することが期待されている。

上記の成果は学術的に高く評価され、日本化学会 論文賞(BCSJ Award Article)を受賞した。さらに、上記研究成果の事業化プランが評価され、NEDO 2023 年度「研究開発型スタートアップの起業・経営人材確保等支援事業/ディープテック分野」での人材発掘・起業家育成事業(NEP)/躍進コース A」、および関西スタートアップインキュベーションプログラム「起動 2 期」(182 件の応募の中から 5 者)に採択された。国や自治体、多数の国内企業や金融機関、科学技術振興機構(JST)や NEDO などと連携し、また国内・国外の医薬学系大学とも協力し、オールジャパン体制で、「産学官金コンソーシアム」による活発な研究・教育活動を行っている。

【特許出願】

1. 発明名称: カーボネート化合物の製造方法(優先権主張出願・PCT)

出願番号: PCT/JP2023/15159

出願日: 2023年4月14日

2. 発明名称: ハロゲン化カルボニルの製造方法(台湾出願)

出願番号: 112145360

出願日: 2023年11月23日

3. 発明名称: ハロゲン化カルボニルの製造方法(優先権主張出願・PCT)

出願番号: PCT/JP2023/40345

出願日: 2023年11月9日

4. 発明名称: 網目状ポリウレタンの製造方法(優先権主張出願・PCT)

出願番号: PCT/JP2023/15159

出願日: 2024年2月2日

5. 発明名称: イソソルビドポリウレタンおよびその製造方法 (優先権主張出願・PCT)

出願番号: PCT/JP2024/8226

出願日: 2024年3月5日

6. 発明名称: ハロゲン化カルボニルの製造方法

出願番号: 特願2023-176533

出願日: 2023年10月12日

7. 発明名称: カルボン酸誘導体およびポリマーの製造方法

出願番号: 特願2024-26689

出願日： 2024年2月26日

【特許取得】

1. カーボネート誘導体の製造方法：韓国10-2542131 (2023年6月7日)
2. ビルスマイヤー試薬の製造方法：日本 7344518 (2023年9月6日)
3. イソシアネート化合物の製造方法：日本 7445265 (2024年2月28日)
4. ポリカーボネートの製造方法：ロシア2798088 (2023年6月15日), 中国 ZL201980074609.4 (2023年7月14日), 台湾 I 825220 (2023年12月11日), 日本7366375 (2023年10月13日), シンガポール11202104285Q (2024年4月26日)
5. カーボネート誘導体の製造方法：台湾I 800693 (2023年5月1日), ロシア2798090 (2023年6月15日), 中国 ZL201980074645.0 (2023年11月14日), 日本 7421772 (2024年1月17日), シンガポール 11202104284V (2024年4月23日)
6. アミノ酸-N-カルボン酸無水物の製造方法：日本 7356707 (2023年9月27日)
7. ハロゲン化カルボニルの製造方法：中国 ZL202080061004.4 (2024年2月6日)
8. ハロゲノギ酸ハロゲン化アルキルエステルの製造方法：日本7425448 (2024年1月23日)

【発表論文】※下記の順で記載

論文タイトル 著者名 誌名 巻(号) 頁 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. クロロホルムを原料とする光オン・デマンドホスゲン化反応を用いるイソシアネートおよびポリウレタンの合成
津田 明彦
機能性ポリウレタンの開発と応用, シーエムシー出版, 265–277, 2023年6月, 日本語, 無, 著書
2. In Situ Photo-on-Demand Phosgenation Reactions with Chloroform for the Synthesis of Polycarbonates and Polyurethanes
Akihiko Tsuda, *Polym. J.* 55, 903–912, 2023年6月, 英語, 有, 総説(学術雑誌)
3. Non-Isocyanate Polyurethane Synthesis by Polycondensation of Alkylene and Arylene Bis(fluoroalkyl) Bis(carbonate)s with Diamines
Sasuga Hosokawa,[§] Akihiro Nagao,[§] Yuka Hashimoto, Ayako Matsune, Takashi Okazoe,* Chitoshi Suzuki, Hiroshi Wada, Toshifumi Kakiuchi, and Akihiko Tsuda* (§:equal contribution)
Bull. Chem. Soc. Jpn. 96, 663–670, 2023年7月, 英語, 有, 研究論文(学術雑誌)
4. Photo-on-Demand In Situ Phosgenation Reactions That Cross Three Phases of a Heterogeneous Solution of Chloroform and Aqueous NaOH
Akihiko Tsuda,* Naoko Ozawa, Ryo Muranaka, Tomoya Kuwahara, Ayako Matsune, and Fengying Liang
ACS Omega 8, 27802–27810, 2023年7月, 英語, 有, 研究論文(学術雑誌)
5. Flow Photo-on-Demand Synthesis of Vilsmeier Reagent and Acyl Chlorides from Chloroform and its Applications to Continuous Flow Synthesis of Carbonyl Compounds
Yue Liu, Yukina Shirai, Itsuomi Okada, Ryota Ohmura, Fengying Liang, and Akihiko Tsuda*
Org. Process Res. Dev. 28, 1632–1639, 2023年9月, 英語, 有, 研究論文(学術雑誌)
6. Photo-on-Demand In Situ One-Pot Synthesis of Carbonate Esters from Tetrachloroethylene
Ikkei Higashimura, Muge Shele, Toshiki Akamatsu, Ryota Ohmura, Fengying Liang, Takashi Okazoe, and Akihiko Tsuda*
J. Org. Chem. 89, 1864–1872, 2024年1月, 英語, 有, 研究論文(学術雑誌)

【学会発表】※下記の順で記載

発表タイトル 発表者名 会議名 開催場所 発表年 月 国内・国際区分 発表形態 発表言語

1. 光オン・デマンド合成法を用いるポリマーや医薬品中間体の合成 津田 明彦 フォトポリマー懇話会 第 254 回 講演会『光反応・重合技術の新展開』 オンライン 2023 6/16 国内 口頭発表(招待) 日本語
2. 光オン・デマンドホスゲン化反応を用いる医薬品中間体と機能性ポリマーの合成 津田 明彦 旭化成(株)社内 講演会 東京+オンライン 2023 9/22 国内 口頭発表(招待) 日本語
3. フロー光オン・デマンド有機合成法を用いる医薬品原薬や中間体およびポリマーの合成 津田 明彦 令和 5 年度化学プロセス研究コンソーシアム全体会議 京都大学工学研究科 2023 9/29 国内 口頭発表(招待) 日本語
4. ジクロロメタンを用いるエステルとアセタールの光オン・デマンド合成 大村 亮太・津田 明彦 日本化学会秋季 事業 第 13 回 CSJ 化学フェスタ 2023 東京 2023 10/19 国内 ポスター発表 日本語
5. フロー光オン・デマンド合成法による Vilsmeier 試薬とカルボニル化合物の連続合成 白井 雪菜・劉 悦・津田 明彦 日本化学会秋季事業 第 13 回 CSJ 化学フェスタ 2023 東京 2023 10/19 国内 ポスター発表 日本語
6. フッ素化アルキルポリウレタンの非イソシアネート合成法と特異的性質 津田 明彦・永尾 彰浩・鈴木 千登志・岡 添 隆 第 32 回ポリマー材料フォーラム 名古屋 2023 11/30 国内 ポスター発表 日本語
7. <環境負荷低減へ向けた> ポリウレタンの開発と応用 –非イソシアネート、微生物、バイオマス、CO₂– 津田 明彦 (株)技術情報協会 セミナー オンライン 2024 1/18 国内 口頭発表(招待) 日本語
8. 音と光による有機分子の状態や反応の制御 津田 明彦 2023 年度第 1 回 日本化学連合シンポジウム「ヒューメインな化学 ～感覚の世界に化学はどう挑むか～」 オンライン 2024 1/22 国内 口頭発表(招待) 日本語

【書籍等】※下記の順で記載

タイトル 担当区分 著者名 出版社・発行元 出版年月 記述言語 査読有無 種別

1. クロロホルムを原料とする光オン・デマンドホスゲン化反応を用いるイソシアネートおよびポリウレタンの合成 単著 津田 明彦 265-227 機能性ポリウレタンの開発と応用, シーエムシー出版 2023

【受賞】※下記の順で記載

賞名称 受賞者 受賞対象 授与機関名 受賞区分 受賞年月 国内国外区分

1. BCSJ 論文賞 細川流石,永尾彰浩,橋本優香,松根絢子,岡添隆,鈴木千登士,和田浩志,柿内俊文,津田明彦 日本化学会 2023 年 7 月 国内
2. 関西スタートアップインキュベーションプログラム「起動2期」 津田 明彦 光オン・デマンド合成法によるバイオ由来医薬品原薬と中間体の製造販売 大阪産業局 2024年3月

2023年度 教育実績報告書

化学専攻

目次

1. 物理化学講座

1－1. 分子動力学 (和田昭英, 笠原俊二)	1
1－2. 物性物理化学 (大西 洋, 木村建次郎, 枝 和男)	4
1－3. 反応物理化学 (小堀康博, 立川貴士)	7

2. 無機化学講座

2－1. 固体化学 (持田智行, 内野隆司, 高橋一志)	9
2－2. 状態解析化学 (富永圭介, 秋本誠志)	12

3. 有機化学講座

3－1. 有機反応化学 (林昌彦, 松原亮介)	15
3－2. 生命分子化学 (田村厚夫, 茶谷絵理, 木村哲就)	18
3－3. 有機分子機能 (津田明彦)	24

4. 連携講座

4－1. 構造解析学 (小金澤智之, 上杉健太朗, 関澤央輝)	25
4－2. 理論生物化学 (中嶋隆人, 川嶋英佑, 水流翔太)	28

5. 非常勤講師

5－1. 科学英語 (神前陽子)	31
------------------	----

担当授業科目等				
(全学共通)	化学 C (分担)	第 3 Q	1 コマ	× 4 回
(学部)	(1) 量子化学 I-1・I-2	第 1 Q・第 2 Q	1 コマ	× 1 6 回
	(2) 量子化学 II-1・II-1	第 3 Q・第 4 Q	1 コマ	× 1 6 回
	(3) 分子分光学 2	第 4 Q	1 コマ	× 8 回
	(4) 化学実験 II (分担)	第 3 Q・第 4 Q	2 コマ	× 1 8 回
	(5) 特別研究			
	(※) 化学実験入門	第 4 Q	1 コマ	× 8 回
(博士前期)	(6) 先端融合科学特論(分担)	前期	1 コマ	× 3 回
	(7) 物理化学 II(分担)	後期	1 コマ	× 3 回
	(8) 論文講究 I、II			
(博士後期)	無し			
授業内容と自己評価				
- 化学C この講義は文系の1年生を対象とした授業なので、興味を持ってもらうように、絵やアニメーションを多く取り入れて化学や科学の全体像が掴めるように心掛けた。また、1モルの水素原子を一行に並べた時の長さはどれくらいかといった、直観に訴える問いかけに心掛けた。レポートの結果をみる限りはある程度の目標は達成できたと思われる。 - 量子化学I, II 量子化学I・IIでは、例年の通りの教科書(アトキンスの物理化学の構造の部分[量子力学の導入～等核二原子分子まで])に加えて、参考書としてマッカーリー・サイモンの物理化学を頻繁に参照して進めた。演習問題を前年の約1.2倍に増やして学生に予習・復習を促した。略解は翌週に示して質問をメールで受け付ける形式を採った。講義では学生の理解を深め、数式の内容をイメージできるようにすることを目的として黒板にグラフや図を示すように心がけた。また、中間試験と期末試験では、学生が効率よく復習できることを狙いとして、各自が作成した覚書(A4レポート用紙、1～2枚)の持込を可とした。量子化学IIでは、学生の理解度や説明の良しあしを測るために、毎回簡単な演習をやって提出させた。演習の出来具合と成績には弱いながらもそれなりの相関が認められた。 - 化学実験II (分担) ラマン散乱を利用した振動スペクトル測定の原理、そして基準振動や分光システムの構築の考え方、さらに誤差の考え方と取り扱いについて学習させた。1テーマ当たり5, 6人程度で行う実習であるが、それをさらに2班に分けることで全員が実験に参加して、ただ見ているだけの学生がいない様に心掛けた。実習としては、前半に連成振子の振動周期を実際に測定させることで基準振動の意義とデータ処理、特に誤差の取り扱いについて学ばせた。後半には実際にラマンスペクトルを測定する光学系を組ませてからスペクトルの測定を行わせることで、一歩踏み込んだ分光測定を学ばせた。さらに、実習中に学生同士で発言・議論を促すように心がけた。 - 分子分光学 2 分光学の基礎となる光と分子の相互作用に関しては、時間依存の摂動論に基づいて高次の相互作用まで説明した。分光学は量子論を基礎とした話になるので、「学生にいかんしてイメージを持たせて理解させるか」が学生が興味を持つかどうか				

の分かれ目になると思われる。そのため学生にイメージと興味を持たせることを目的として、図やグラフを多用した説明に加えて、レーザーポインタを使った簡単な実験や定規やCDを回折格子として使った実験などを行った。

- ・ 物理化学 II (分担)

統計熱力学の基礎について講義をした。特に熱力学と統計熱力学の関係、ボルツマンの原理、アンサンブルの考え方の3点に重点を置いて講義を行った。熱力学と統計力学の視点の違いや、ボルツマンの原理に基づいて統計力学を使った熱力学の再構築、そしてボルツマン分布の理解について詳しく説明した。また、マックスウェル・ボルツマンの分布則については、分布側を理解する際に見落としがちな縮退の考え方や量子効果の影響を交えて説明した。

- ・ 先端融合科学特論 (分担)

分光学で観測される非日常的な現象(多光子過程・コヒーレント相互作用)について説明した。レポート課題として、多光子過程かコヒーレント相互作用を使った研究成果の論文を読ませて、概要と意見を課題とした。レポート結果をみる限りはある程度の目標は達成できたと思われる。

- ・ 化学実験入門

この科目は2021年度から導入された科目で、学部1年生になるべく早く化学実験に触れてもらうこと、そして研究室で実際に大学院生に混じって実験やデータ解析を行うことで実際の実験研究を経験してもらうことを目的としている。単位はつかない。今年は光化学反応とその計測システムについて、その原理からシステム構築、測定、解析までを経験させた。履修した学生からは以下の様な感想をもらったことから、当初の目的は果たせたと考えている。

- ・ 実験が楽しく、研究室の雰囲気も分ってとても有意義だった。

- ・ 知識が増えたのはもちろん、話で聞くのとは異なり実際に研究室にお邪魔することで、実験の進め方や先輩方がどのようなことをしているのかということを知れたという点で、履修してよかったと感じました。

- ・ 研究室や実験室に入らせて頂いて、大学での研究とその手法を垣間見ることができ、とても貴重な体験になりました。

- ・ 「細かい作業が多く大変だった」といった実際に実験して初めて実感することができることを経験させることもできた。

その他の特記事項

担当授業科目等						
(全学共通) (学部)	(1)	化学実験 2 (分担)	4Q	2 コマ	×	5 回
	(2)	基礎物理化学 (分担)	4Q	1 コマ	×	4 回
	(3)	量子化学Ⅲ-1, Ⅲ-2	1・2Q	1 コマ	×	1 6 回
	(4)	分子分光 1	3Q	1 コマ	×	8 回
	(5)	量子化学Ⅲ (分担)	後期	1 コマ	×	8 回
	(6)	化学実験Ⅱ (分担)	後期	2 コマ	×	1 8 回
	(7)	特別研究				
(博士前期)	(8)	物理化学Ⅰ (分担)	前期	1 コマ	×	5 回
	(9)	反応化学特論 (分担)	前期	1 コマ	×	5 回
	(10)	論文講究Ⅰ,Ⅱ				
	(11)	特定研究Ⅰ,Ⅱ				
(博士後期)	(12)	物理化学特論Ⅰ (分担)	前期	1 コマ	×	3 回
	(13)	特定研究				
授業内容と自己評価						
(1) 化学実験 2 では、吸収スペクトル測定と量子化学計算による振動解析を行った。学部での専門的な講義の前の先行型の実験となったため、実験前の説明を工夫して初心者向けの量子化学計算の紹介を行った。 (2) 文系学生向けの講義を 4 回担当した。興味を持ってもらうために身近な現象を取り上げて図や動画を多用して物理化学の視点から解説した。 (3) (4) 量子化学Ⅰ,Ⅱ で理論的に構成したエネルギー準位を、観測されるスペクトルという観点も加えて講義した。(3) では電子遷移と振動遷移について、(4) では回転遷移とイオン化について、演習も加えてより深く理解させるよう工夫した。(3) の学生授業評価総合判断の平均は 4.58 であり、学生の満足度は高いと思われる。 (5) 後半部分を担当した。量子化学Ⅰ,Ⅱ の内容についての演習を中心に、毎回小テストまたはレポートを課し、添削して返却・解説した。初回に実施したアンケートの結果を講義内容に反映させ双方向の授業を目指した。授業評価総合は 4.5 であった。 (6) 分子のスペクトルの測定原理を理解することを目的に基礎的な分光実験を行った。(3) (4) の講義で示したスペクトルを実際に観測・解析することで、スペクトルから分子構造を決定できることを理解してもらえたと思う。 (8) 博士前期課程の学生に対して、前期に開講した。学部での量子化学の復習から始まり、摂動論をエネルギー準位間の相互作用として具体例を挙げつつ講義した。角運動量の合成、磁場や電場による相互作用を中心に解説した。 (9) 博士前期課程の学生に対して、分子衝突理論から反応ポテンシャル曲線の解説を中心に、反応動力学の実験紹介も併せて行った。 (12) 博士後期課程の学生に対して、高分解能分光に関する講義を行うとともに、学生の研究テーマについて議論を行い、双方向の授業を行った。 (7) (10) (11) (13) 学部生 2 名、博士前期課程 3 名、博士後期課程 1 名の教育・研究指導を行った。毎週英語のテキストまたは論文等の輪読を行い理解を深めた。						
その他の特記事項						

担当授業科目等			
(全学共通)	(1) 基礎物理化学 1	3Q	1 コマ × 8 回
(学部)	(2) 物理化学基礎	1Q	1 コマ × 8 回
	(3) 表面化学 1	3Q	1 コマ × 8 回
	(4) 化学熱力学Ⅲ-2	2Q	1 コマ × 8 回
	(5) 化学実験Ⅱ (分担)	3-4Q	2 コマ × 2 4 回
	(6) 特別研究		
	(7) 地球化学特論 (分担)	3-4Q	1 コマ × 8 回
(博士前期)	(8) 物理化学Ⅱ (分担)	後期	1 コマ × 4 回
	(9) 論文講究Ⅰ、Ⅱ		
	(10) 特定研究Ⅰ、Ⅱ		
	(11) 地球化学特論 (分担)	3-4Q	1 コマ × 8 回
(博士後期)	(12) 地球化学特論 (分担)	3-4Q	1 コマ × 8 回
授業内容と自己評価			
●全学共通 (1) 物理学科・生物学科・惑星学科の 1 年生に熱力学の基礎を教える講義を担当した。 ●学部 (2) 高校理数系科目と大学の化学をつなぐための科目である。完全対面で実施できた。(3) 固体表面を化学することのおもしろさと難しさを伝えることが目的の選択科目である。この授業は実社会と化学の関わりについて時間を割いて説明している。昨年「英語で講義し日本語の配布物を配る」形式にあらためた。受講生の成績および授業振返りアンケートの結果を見たところでは、日本語使用を禁止しない範囲で英語を優先使用した授業形態は受講生に受け入れられたと判断する。 (4) 昨年度から担当をはじめた科目である。化学熱力学(マクロ)と量子化学(ミクロ)を接合しようとする統計力学の基礎をできるだけ具体的に理解させるために宿題と小テストを頻発する形式をとった。(5) 昨年までと同様に熱測定と誘電率測定を担当した。レポートをオンライン提出(BEEF+利用)とした。受取と返却にかかる手間を減らすことができた。 ●博士前期 (8) サイコロと PC を使った統計力学の卓上実験を受講生にやらせて、その結果と解釈を日本語でプレゼンテーションさせた。 ●研究指導 (6) (9) (10) 博士前期 3 名・学部 2 名を主任指導した。どのくらい失敗させることが学生本人の能力向上にとって適切であるかの判断が例年むずかしい。 ●学部 (7) 博士前期 (11) 博士後期 (12) 石橋純一郎(本学海洋底探査センター教授)を主担当者とする集中講義を、本年度初めて企画設営した。環境化学をテーマとする科目を化学科・化学専攻のカリキュラムに取り入れることができた。			
その他の特記事項			

担当授業科目等				
(全学共通) (学部)	(1) 基礎物理化学 2	第 4Q	1 コマ × 8 回	
	(2) 量子化学Ⅲ (分担)	後期	1 コマ × 8 回	
	(3) 計算機化学実験	後期	2 コマ × 8 回	
	(4) 表面化学 2	第 4Q	1 コマ × 8 回	
	(5) 特別研究			
(博士前期)	(6) 物理化学Ⅱ (分担)	後期	1 コマ × 4 回	
(博士後期)	(7) 特定研究			
授業内容と自己評価				
(1) 解析力学の基礎を概説した。必要となる数学的知識を補足しながら、特に変分法に関しては練習問題を交えて丁寧に説明し、本年度は統計力学の基礎の説明も加え、プランク理論を紹介した。化学問題の基礎となる古典力学、前期量子論の導入に向けて、直感的理解がしやすいように配慮した。最終回では、霧箱の実験を講義室で紹介した。 (2) 本講義では、手を動かして問題を解くことに主眼が置かれている。多くの知識を習得するよりも実問題を解くことができる能力が極めて重要であることから、量子化学の基礎となる古典力学、量子力学における重要な計算を説明し、演習問題として出題した。 (3) 本講義では、計算ソフトウェア maple を用いた、数値計算、プログラミングを指導する。Maple では、入力した数式に対して直感的理解が得られやすく、理論教育が重視された理学部の学生においては極めて有用である。荷電粒子の運動や、反応速度論に関する計算機実験を、自身でプログラムを記述することで、理論および計算原理への理解を深めることができた。 (4) ファンデルワールス力に関して、中性粒子内の電荷の偏りを起源とし、“輻射によるエネルギー損失のない”瞬間的な電場の存在を仮定した、中性粒子間の力の解析的表現を説明した。特に、各受講生が自身で計算し、導くことができるように一つ一つの数学的操作に関して丁寧に説明した。 (6) 物理化学Ⅱでは、統計力学の基礎を講義した。分布関数、リウヴィル方程式、エントロピー、ギブス分布について理解を深めた。Wigner のディラック定数展開について説明し、古典統計力学に基づく自由エネルギーや温度の補正を導いた。 (5) (7) 学士、博士の指導において、 「High-speed reconstruction method for multi-static scattering imaging」、 「弾性波散乱場イメージング技術の開発」、 「誘導磁場を用いた表面下可視化法に関する研究」、 「マイクロ波生体イメージングのための標準試料開発」等を研究課題として取り組んだ。				
その他の特記事項				

担当授業科目等				
(学部)	(1)	高度教養セミナー理学部第 1 クォーター	1 コマ	× 8 回
	(2)	化学熱力学 I-1 第 3 クォーター	1 コマ	× 8 回
	(3)	化学熱力学 I-1 第 4 クォーター	1 コマ	× 8 回
	(4)	化学熱力学演習 (分担)	後期 1 コマ	× 8 回
	(5)	化学概論 (分担)	後期 1 コマ	× 5 回
	(6)	化学実験 II (分担)	後期 2 コマ	× 24 回
	(7)	化学実験 (分担)	後期 2 コマ	× 5 回
	(8)	特別研究		
(博士前期)	(9)	物性物理化学特論 (分担)	後期 1 コマ	× 4 回
	(10)	論文講究 I, II		
	(11)	特定研究 I, II		
授業内容と自己評価				
(1) 将来役に立つテーマを選び、学習を進めた。 (2), (3) 化学現象の理解の基礎となる物理化学の基本概念である内部エネルギーやエンタルピーについて講義した。板書講義から映像を用いた講義に変更し、理解が深まるよう工夫した。学生授業評価総合判断の平均それぞれ 4.53 と 4.38 であった。 (4) 自由エネルギー、化学平衡などの解説を行い、小テストに向けた自習学習を促した。成績は小テストとまとめテストを併用して評価した。 (5) 粉末 X 線回折を題材に回折パターンの指数付けソフトや構造解析ソフトを利用し、X 線回折パターンから結晶構造を調べる方法を体験させるとともに、固溶に伴う単位胞のサイズの変化などについての議論を例に教育を行った。 (6) 物質の性質を理解するための事象を掘り下げ、概念の理解と将来的な応用に繋がるように工夫して講義を行った。 (7) 分からないことを何時でも相談できるように配慮し、許される範囲で面接を行い、実験結果を学生と議論する機会を設け、学習効果の向上を図る工夫を行った。 (8) 熱量測定の実験と測定で得られるデータについて講義を行い、熱力学で習う法則などを実地で理解できるように教育を行った。また、実際のデータを用いた課題を課し、学生が自分で取り組むことによって授業内容への理解度が向上するとともにそれらを利用した実際の研究への応用も可能であるよう工夫した。 (9) B4 生 2 人の教育・研究指導を行った。特別研究をまとめさせ、うち 1 人は博士前期課程へ進学させることができた。残りの 1 名は就職希望であったため、研究テーマも本人の将来に繋がるものに変更して指導した。 (10) X 線の散乱現象に関わる基礎を直感的な理解も進むように講義するとともに、構造解析に必要な知識とその利用法を授業および課題を通して教育を行った。 (11) M1 生と M2 生各 1 名の教育・研究指導を行った。新しいポリオキシメタレート生成反応について実実験と計算機実験を併用し物理化学的に解析することに取り組んでもらった。その成果を春と秋の学会で発表をさせることもできた。				
その他の特記事項				

担当授業科目等					
(全学共通)	該当なし				
(学部)	(1) 化学反応論 I	第 1 Q	1 コマ	×	8 回
	(2) 化学熱力学 II-1	第 1 Q	1 コマ	×	8 回
	(3) 化学熱力学 III-1	第 1 Q	1 コマ	×	8 回
	(4) 化学熱力学 II-2	第 2 Q	1 コマ	×	8 回
	(5) 化学実験 II (分担)	後期	2 コマ	×	6 回
	(6) 特別研究				
(博士前期)	(7) 物理化学 I (分担) I	後期	1 コマ	×	5 回
	(8) 反応化学特論 I (分担)	前期	1 コマ	×	5 回
	(9) 論文講究 I、II				
	(10) 特定研究 I、II				
(博士後期)	開講なし				
授業内容と自己評価					
(1) 化学反応の速度論的な取り扱いについて授業を行った。レポート提出を 4 回程度課した。中間試験にて理解度をみて総合成績を評価した。授業に対する満足度と学習内容の理解度が高い。試験の結果もおおむね良好であった。 (2) 2 年次を対象にエントロピーの復習を丹念に行い、ギブズ自由エネルギーや、相平衡、平衡についての熱力学的事項の講義を行った。エントロピー効果が、相転移や、混合平衡、化学平衡に重要な役割を果たすことを丁寧に説明した。さらにこの概念を量子論に基づく分子論的描像に結びつけ、分配関数を用いる統計論的描像への橋渡しを行った。小テストの集計と期末考査の点数で成績評価した。 (3) 統計力学の導入により、様々なマクロ量である熱力学性質とミクロな量子力学的エネルギー準位をつなげるための基礎的な事項について、丁寧に説明した。分配関数を用いる統計論的描像を導入し、内部エネルギーとエントロピーの概念を理解させた。小テストの集計と期末考査の点数で成績評価した。 (4) 2 年次を対象に相図、混合物と活量、化学平衡について講義を行った。小テストの集計と期末考査の点数で成績評価した。 (5) 蛍光寿命測定による振動子強度の決定を学生実験室にて行った。光の吸収と放出の量子論的性質について、および遷移双極子モーメントと電子軌道との関連について、レポートにまとめさせた。理解度はおおむね良好であった。 (9, 10) 学部生 2 名、博士前期課程 4 名を主任指導した。研究相談会・雑誌会を毎週行い、随時測定や解析など研究活動について指導に当たった。 (7) 大学院生向けに、磁気共鳴分光法の原理を修得させスペクトルの持つ情報を理解することを目指し、量子化学に基づく講義と演習を行った。 (8) 大学院生向けに、速度論的な化学反応の理解をさらに深めるため、反応の動力学的側面として電子移動反応理論と電子的相互作用について概説した。					
その他の特記事項					
講義は対面・オンラインハイブリッド型で行い、その動画を Beef にアップし、学生の自習活動による復習に活用してもらった。					

担当授業科目等				
(全学共通) (学部)	(1) 情報基礎	第1 Q	1 コマ	× 8 回
	(2) 高度教養セミナー理学部	第1 Q	1 コマ	× 8 回
	(3) 初年次セミナー	第1 Q	1 コマ	× 1 回
	(4) 高度教養セミナー理学部化学入門	後期	1 コマ	× 1 回
	(5) 化学反応論 2	第2 Q	1 コマ	× 8 回
	(6) 物理学科化学概論	後期	1 コマ	× 5 回
	(7) 化学実験 II (分担)	後期	2 コマ	× 2 4 回
	(8) 化学熱力学 III	後期	1 コマ	× 8 回
	(9) 特別研究			
(博士前期)	(10) 物理化学 I (分担)	前期	1 コマ	× 5 回
	(11) 反応化学特論	前期	1 コマ	× 5 回
	(12) 論文講究 I, II			
	(13) 特定研究 I, II			
授業内容と自己評価				
(1) 課題の採点とフィードバックを担当した。いずれの学生も熱心に取り組んでいた。 (2) 単一分子蛍光法に関する外国語総説論文を教材とし、関連する光物理・光化学に関する基礎的理解を深めるための解説と討論を行った。 (3, 4) 光エネルギー変換など、研究室での研究テーマ等に関する紹介を行った。 (5) 拡散律速・活性化律速反応、酵素反応、光化学反応、遷移状態理論に関する基礎的事項について対面で講義した。出席状況、小テストにて理解度をみて総合成績を評価した。学生の受講態度は良好であった。 (6) 化学熱力学の講義を対面で行った。授業中に演習問題を行うことで理解度を確認した。授業への意欲に個人差が多い印象を受けた。 (7) 電気化学的手法を用いた電子移動反応の観測および解析を行った。測定原理と電子移動反応理論についての解説を行ったあと、対面での実験を行った。学生の意欲、理解度はともに良好であった。 (8) 化学熱力学の理解を深めるために演習問題を解かせるとともに、発展的内容に関する補足的説明を対面もしくはハイブリッドで行った。毎回小テストを行い、理解度を確認した。扱った内容は気体の分子運動論、エンタルピー、エントロピーなどである。解答とその解説を行い、次回の小テストに向けた自習学習を促した。アンケートの結果、授業の説明に対する満足度は良好であった。 (9, 12, 13) 学部学生 2 名、大学院学生 5 名を主任指導した。研究報告会と雑誌会を毎週行うと共に随時測定や解析など研究活動について指導にあたった。 (10) 分子の光吸収および蛍光、励起分子の反応と緩和、光化学反応などに関して理解を深めるための授業を対面で行った。試験にて理解度をみて成績を評価した。学生の受講態度、試験の結果はともに良好であった。 (11) 不均一界面における電子移動反応などに関する講義を対面で行った。学生の受講態度、試験の結果はともに良好であった。				
その他の特記事項				

担当授業科目等				
(学部)	(1)	無機化学 I-1, I-2	第 3Q, 4Q	1 コマ × 15 回
	(2)	分析化学 II-2 (分担)	第 3Q, 4Q	1 コマ × 3 回
	(3)	無機機能化学 1 (分担)	第 3Q	1 コマ × 2 回
	(4)	無機化学基礎 2 (分担)	第 1Q	1 コマ × 5.5 回
	(5)	化学実験 I (分担)	第 1Q	2 コマ × 24 回
	(6)	化学実験 1 (分担)	第 3Q	2 コマ × 3 回
	(7)	特別研究		
(博士前期)	(8)	無機化学 I (分担)	前期	1 コマ × 7.5 回
	(9)	先端融合科学特論 A (分担)	前期	1 コマ × 2 回
	(10)	論文講究 I、II		
	(11)	特定研究 I、II		
授業内容と自己評価				
(1) 無機化学 I-1, I-2: 指定教科書に沿って無機化学の基礎(原子、電子配置、結合、固体)について計画的に講義を行った。定着率、学習意欲はほぼ例年通りだった。 (2) 分析化学 II-2 (分担): 無機物質の磁化率と熱測定について講義を行った。学習状況も良好であり、教育効果は高かったものとする。 (3) 無機機能化学 1 (分担): 金属錯体の構造・物性およびイオン液体等のソフトマターの性質に関して講義した。履修者の学習状況は、ほぼ例年通りであった。 (4) 無機化学基礎 2 (分担): 分析化学に関する基礎的事項について解説した。提出された課題等からみて、学生の理解度も概ね高く、良好な講義ができたとする。 (5) 化学実験 I (分担): 合成実験に加え、測定実験として、磁化率およびソルバトクロミズムの実験を担当した。学生の取り組み状況には個人差がみられたが、教育効果は概ね良好だったとする。ただし、今年度は事前予習・予習課題への取り組みを行っていない学生が大半を占めた。この点は課題であり、次年度は事前確認の対策を行うことが必要と思われる。 (6) 化学実験 1 (分担): 定性分析等を、安全に十分配慮しつつ指導した。 (8) 無機化学 I: 遷移金属各論および有機金属の基礎について、指定教科書を利用しながら講義した。広範な題材を扱ったが、レポート課題等の状況も概ね良く、教育効果も良好と考えられる。 (9) 先端融合科学特論 A (分担): 金属錯体およびイオン液体の分析および物性評価について実例をもとに解説した。レポート課題でさらに知見が深まったことが確認できた。 (10) 論文講究 I、II: 文献紹介等を計画的に進行し、有意義な内容とすることができた。 (7, 11) 特別研究・特定研究: B4(1名)、M1(2名)、M2(1名)の研究指導を行った。研究への取り組みも良く、良好な指導が行えた。				
その他の特記事項				

担当授業科目等					
(全学共通)	(1)	基礎無機化学 1, 2	1Q, 2Q	1 コマ	× 1 5 回
(学部)	(2)	化学実験 I (分担)	前期	2 コマ	× 2 4 回
	(3)	固体化学	前期	2 コマ	× 1 5 回
	(4)	分析化学 II-1 (分担)	後期	1 コマ	× 3 回
	(5)	特別研究			
(博士前期)	(6)	無機・分析化学特論 1	3 Q	1 コマ	× 7 回
	(7)	論文講究 I, II			
	(8)	特定研究 I, II			
授業内容と自己評価					
(1) 基礎無機化学 1, 2 : 無機化学の基礎について、理学部の化学科以外の学生向けに講義を行った。受講者が多様な学科に属していることを鑑み、化学の他分野の研究との関連についても意識しながら講義を行った。 (2) 化学実験 I (分担) : 全学的にはコロナ禍による講義の制限はなくなったが、昨年度に引き続きできる限り実験室内が密にならないよう、分散して実験を行った。これまで合成実験は、各自が計画を立てて合成を行う方法を採用していたが、確実に期限内の終わらせるために、その日その日の合成手順を指定して合成を行わせるようにした。おおむね順調に合成実験が完了したと思われる。 (3) 固体化学 : 固体中の電子状態の計算手法 (自由電子近似と強束縛近似) の基礎を講義した。本講義の目的は、フェルミ粒子の統計力学についての基礎知識を得ることであるが、理解の手助けのため、古典的粒子の統計力学的考えについても講義した。さらに、フェルミ分布関数を導出する際には、その過程がよくわかるよう丁寧に講義するよう心がけた。講義の後半では、半導体中の電子状態について詳しく講義した。また、p-n 接合によるダイオードの発現機構についても説明した。 (4) 分析化学 II-1 (分担) : 本講義では、X線の回折現象を逆格子空間の観点から説明した。演習であることを考慮して、学生自身に作図の課題を多く課した。 (5) 特別研究 : 2名の研究指導を行った。1名は超伝導/常伝導ナノ複合体の超伝導特性に関する研究、もう1名はh-BNの新規合成と結晶性に関する研究を行った。 (6) 無機・分析化学特論 1: 光と物質の相互作用について講義した。英文の原著 (Laudon, The Quantum Theory of Light) を購読する形で講義を進めた。テキスト購読だけでは理解しにくい点に関しては、詳しく説明するように心がけた。履修学生の意識は高く、十分な教育効果は得られたと思う。 (7) 特定研究 I, II : M1 (2名), M2 (2名) の研究指導を行った。M2 の2名は、筑波の物質・材料研究機構や、岡崎の分子科学研究所などの外部施設で積極的に実験を行い、質の高い修士論文の完成につなげた。研究成果に基づき、M1 および M2 の学生につき、5 回程度の学会発表を行った。なお、M2 の学生1名が、学会発表で講演賞を2度受賞した。 (8) 論文講究 I, II : 最近の原著論文や英文の教科書を M1 (2名), M2 (2名) とともに輪読形式で講究した。英文の教科書として、H. Ibach & H. Luth 著の Solid State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science を選び、特に固体の電子構造、結晶構造の章に焦点をあてて輪読を行った。原著論文購読は、一人当たり5報程度の論文紹介を課した。					
その他の特記事項					

担当授業科目等		
(全学共通)	(1) 化学実験 1・2 (分担)	3Q, 4Q 2コマ×10回
(学部)	(2) 無機化学基礎 1	1Q 1コマ×7.5回
	(3) 無機化学Ⅲ-1・2	3Q, 4Q 1コマ×15回
	(4) 分析化学 II (分担)	後期 1コマ×3回
	(5) 無機機能化学 1 (分担)	3Q 1コマ×6回
	(6) 化学実験 I (分担)	前期 2コマ×10回
	(7) 特別研究	
(博士前期)	(8) 無機化学 I (分担)	前期 1コマ×7.5回
	(9) 論文考究 I、II	
	(10) 特定研究 I、II	
授業内容と自己評価		
(1) ほぼ例年通りの実験内容をすべて対面で実施した。実験手順をより丁寧に説明するように工夫した。実験ノート書き方、レポートの書き方について、学生に十分指導していく必要性を感じた。 (2) 原子の構成から、原子軌道、分子軌道、錯体の性質について、電子の振る舞いとエネルギーの概念で説明されることを講義した。学生自身に作図や計算をしてもらう課題を毎回課し、次の講義で解説するようにした。学生の理解度を高めるよう内容を更新し、学生の理解は向上しているように感じている。 (3) III-1 では結晶の対称性と X 線構造解析、III-2 では固体の構造の記述と熱力学的取り扱い、強束縛近似によるバンド構造の基礎を講義した。BEEF 上で小テストを課し、授業内容を確認できるように工夫した。この形式は学生にも好評のようである。 (4) 走査型電子顕微鏡、X 線の発生、X 線蛍光スペクトル、X 線吸収スペクトルの原理に関する講義と演習を行った。化学実験 1 の内容ではないが、取り扱われる実験との関連を示しながら講義を行った。 (5) 固体物質の示す機能性(伝導性、磁性、誘電性)の基礎とそれぞれの関連に関して対面講義を行った。具体的な研究例、応用例、またノーベル賞との関連などを数多く取り上げ、内容も更新した。基礎的な事項を小テストで確認するようにした。 (6) 錯体の合成と ESR を担当した。実験手順それぞれで何が起きているか自ら考え予想しながら操作することの重要性を指導した。ESR については基礎的な原理を中心に解説した。 (7) :B4 (2 名) の単結晶 X 線構造解析と磁性に関する英語テキストの輪読、研究指導・論文講読を行った。 (8) 固体電子物性について講義した。単結晶 X 線構造解析の原理、固体バンド構造とバンド構造から得られるパラメータの導出について講義した。関連原著論文を理解できるよう具体例を盛り込むよう工夫した。 (9) (10) :M1 (2 名) と M2 (2 名) の研究指導・論文講読を行った。学会で4件の口頭発表、3 件のポスター発表につながった。自らの研究でも幅広い観点から検討していくことを指導していく必要性を感じている。		
その他の特記事項：		

担当授業科目等			
(全学共通)	(1) 化学 D	後期	1 コマ × 7.5 回
(学部)	(2) 化学実験 I (分担)	前期	2 コマ × 24 回
	(3) 溶液化学-1, -2	前期	1 コマ × 15 回
	(4) 分析化学 II (分担)	後期	1 コマ × 3 回
	(5) 特別研究		
(博士前期)	(6) 無機化学 II (分担)	後期	1 コマ × 7.5 回
	(7) 溶液化学・生物無機化学特論 (分担)	前期	1 コマ × 7.5 回
	(8) 論文講究 I、II		
	(9) 特定研究 I、II		
授業内容と自己評価			
(1) 化学 D 内容はほぼ例年通り行った。1. 化学だけでなく広く 20 世紀の科学の発展と今後近未来の進展について講義した。2. 水の異常性について講義した。3. 光と分子の相互作用に関する話題を講義した。ほぼ、毎回、小レポートの課題を出して、各自で調べまとめるようにしている。マイクロプラスチック、メタンハイドレート、植物工場など、化学に関する時事問題を取りあげ、化学の視点から議論を行うという課題を出している。コロナウイルスと関係のある話題も提供した。 (2) 化学実験 I：担当している「dd 吸収」は、これまで期間中 5 班で行っていたが、2022 年度からそれを 3 班にした。そのため、1 班が 6~7 名から、11~12 名と増えた。これにより化学実験の時間中に測定したスペクトルの解析（定規を用いて吸収極大波長とモル吸光係数を求める）を行うことができ、その結果を全員が共有した。そのため、レポートの作成にあたっては、考察により多くの時間を割くことができるようになった。一方、実際に吸光光度計を操作する機会が減ってしまったため、TA が配慮し、全員が装置の操作を実施できるようにした。 (3) 溶液化学-1, -2：講義内容は、例年通り行なった。演習、宿題は毎年、新しいものをたすようにしている。 (4) 無機・分析化学演習：ほぼ例年通り行なった。 (5) 特別研究：ほぼ例年通り行なった。 (6) 無機化学 II：対面で行った。ほぼ例年通り行なった。 (7) 溶液化学・生物無機化学特論：液体の統計力学と液体の動力学、反応動力学について講義した。特に反応動力学については電子移動について触れ、実際の電子移動の研究を紹介した。 (8) 論文講究 I、II、(9) 特定研究 I、II：ほぼ例年通り行った。			
その他の特記事項			
上記講義の他に、学部生・大学院生向けの学部生・大学院生向けのプレミアムプログラムレクチャーについても、外国人講師への依頼、シラバスの入力、日程調整、成績入力などを行った。人間発達環境学研究科と行っているプログラム教育コース「環境・化学プログラム教育コース」について理学研究科側の世話人を担当している。人間発達環境学研究科のほうで、授業をハイブリッドで行ってくれたため、理学研究科側の学生が人間発達環境学研究科に出向く必要がなく学生側としては効率よく受講することができた。			

担当授業科目等						
(全学共通) (学部)	(1)	化学実験 1 (分担)	3 Q	2 コマ	×	3 回
	(2)	無機化学 II-1, II-2	前期	1 コマ	×	1 5 回
	(3)	化学実験 I (分担)	前期	2 コマ	×	2 4 回
	(4)	分析化学 II-1 (分担)	3 Q	1 コマ	×	3 回
	(5)	無機機能化学 2	4 Q	1 コマ	×	7. 5 回
	(6)	特別研究				
(博士前期)	(7)	溶液化学・生物無機化学特論 (分担)	前期	1 コマ	×	7. 5 回
	(8)	無機化学 II (分担)	後期	1 コマ	×	7. 5 回
	(9)	論文講究 I, II				
(博士後期)	(10)	特定研究 I, II				
	(11)	特定研究				
授業内容と自己評価						
(1) 化学実験 1 : 1 年次に開講し, 早めに実験を体験する方が効果的であるように思われる。						
(2) 無機化学 II-1, II-2: シュライバー&アトキンス著・無機化学第 4 版の第 2 章 (分子構造と結合), 7 章 (分子の対称性), 19 章 (d 金属錯体) についての講義を行った。						
(3) 化学実験 I: 特に、金属錯体の吸収スペクトル測定および解析を担当した。現在コンピューターが必携となっているので、解析には各自のコンピューターを用いた。不慣れな学生も多かったが、SA と TA の協力により、コンピューターを使った解析方法について学生の理解度を高めることができた。また希望者に対して、提出されたレポートについて個別にコメント・議論をする日を設けた。						
(4) 分析化学 II-1: 電子スペクトル、光電子スペクトルを担当した。無機化学 II-1, II-2 (2 年次前期) と化学実験 I (3 年次前期) の内容を補完し、理解を深めることができた。						
(5) 無機機能化学 2: 生物無機化学の基礎について、光合成反応を題材にして講義を行った。各自のコンピューターを使い、色素タンパク質複合体の構造と金属の配置を確認させた。立体構造の理解が必要な内容について、配布資料のみの講義よりも理解が深まったように思われる。						
(6) 特別研究: 研究室配属された 4 回生に対し研究指導を行った。						
(7) 特に生体系で見られる励起エネルギー移動について、理論、測定の両面から解説を行った。						
(8) 無機化学 II: シュライバー・アトキンス・無機化学第 6 版第 26 章 (生物無機化学) についての講義を行った。受講生が少なかったため、各受講生に質問を与えながら講義を進め、理解を深めた。						
(9) 論文講究 I, II: 論文を選び詳細に内容を報告させる他に、年月を指定しその期間中に公開された、研究室に関連する論文を調査し概要を報告させた。修士論文の作成時に、引用文献が増え議論が充実することを期待している。						
(10) 特定研究 I, II: ほぼ例年通りに研究指導を行った。						
(11) 特定研究: 留学生 1 名を指導した。						

その他の特記事項：化学実験入門（単位無し）として3名の学部1回生を受け入れた。微細藻の生物化学的な取り扱い方，光合成初期過程のレーザー分光測定などを体験してもらった。成績に直接的には反映されない，教員と学生の自主性だけで行われる教育も大切であると実感する。

担当授業科目等					
(学部)	(1) 有機合成化学	後期	1 コマ	×	15 回
	(2) 化学実験 (分担)	前期	2 コマ	×	4 回
	(3) 特別研究	通年			
(博士前期)	(4) 有機化学特論	前期	1 コマ	×	15 回
	(5) 論文講究 I、II				
	(6) 特定研究 I、II				
授業内容と自己評価					
(1) 有機合成化学の講義は 3 年生の後期ということもあり、受講者が有機系志望者に限られる傾向が感じられた。内容に関しては 1 年生から 3 年生前期までの総復習を兼ねて、逆合成経路解析の考え方からプロスタグランジンとタキソールの合成を例にとりあげて講義を行った。2022 年度は 2 年ぶりに対面授業で行った。 (2) 学生実験はほぼ新型コロナ以前のカリキュラムに戻した。 (3) 特別研究は卒研生 (1 名) の研究指導を行った。 (4) 遷移金属錯体を触媒に用いた有機合成反応を中心に講義を行った。留学生が複数受講したため、資料はすべて英語、使用言語も基本英語で行った。2022 年度は 2 年ぶりに対面授業で行った。 (5) (6) M1 (3 名)、M2 (1 名) の研究指導を行った。論文講究は新型コロナ以前に戻し、すべて対面で行なった。成績評価基準もあらかじめ明示し、その基準に基づいて厳格な成績をつけた。教務学生係に成績を提出する前に、学生個々人に成績を開示し、不服申し立ての期間も設け、納得した上で成績を提出した。実際には不服申し立てはなかった。					
その他の特記事項					

担当授業科目等		
(全学共通) (学部)	(1) 基礎有機化学 1, 2	第 1、2 Q 1 コマ × 1 5 回
	(2) 化学実験 I (分担)	前期 2 コマ × 1 3 回
	(3) 有機化学基礎 1, 2	第 1、2 Q 1 コマ × 1 5 回
	(4) 有機化学演習	前期 1 コマ × 1 5 回
	(5) 有機化学 I-1, I-2	第 3、4 Q 1 コマ × 1 5 回
	(6) 初年次セミナー (分担)	第 1 Q 0.3 コマ × 1 回
	(7) 高度教養セミナー理学部化学入門	第 3 Q 0.3 コマ × 1 回
	(8) 高度教養セミナー理学部 (化学)	前期 1 コマ × 1 5 回
	(9) 特別研究	
(博士前期)	(10) 論文講究 I、II	
	(11) 特定研究 I、II	
(博士後期)	(12) 特定研究	
	(13) 有機化学特論 I	前期 1 コマ × 1 5 回
授業内容と自己評価		
(1) 有機化学を理解するに当たり、基本的となる知識を講義した。教科書を指定し、パワーポイントを用いた講義を行った。また、昨年度と同様、重要な部分をより詳しくし、教科書を読めば理解できる部分は講義中にその都度ページ番号を指定することで講義時間に無駄が生じないようにメリハリをつけた。学生から高い評価を受けベストティーチャー賞を授与されており、現状で授業方法に特段問題はないと考えている。 (2) 有機化学の実験操作の基礎となる、合成、単離、同定などを詳しく説明した。昨年度まではコロナ禍の影響で学生を半数ずつ実験させる対応を行っていたが、今年度からは全員一斉に実験を行うスタイルに戻した。大きな混乱や問題はなく、コロナ禍以前と変わらない学習効果が得られたと考えている。実験ノート書き方も詳しく指導し学生に研究者としての基礎を学習させた。 (3) 今年度より新しく担当となった。有機化学を学ぶ上で重要な分子軌道の考え方、酸性度、異性体に関する箇所を重点的に講義した。酸性度に関しては酸塩基反応に限らず今後の有機反応全般の理解に関わってくるので、覚えるのではなく理解するように指導した。概ね多くの学生が期待していたレベルの学習効果を得ていたと考えている。 (4) 今年度も昨年度と同様、前半に NMR 分光法の基礎と解析練習を行い、後半では簡単な分子の逆合成解析の方法を説明した。NMR 分光法に関しては例年通り多くの学生が理解を深め、簡便な NMR スペクトルであれば化合物を同定できるに至った。逆合成解析では、反応機構よりも方法論の理解に重点を置いて説明したため、有機合成の魅力を伝達できたと考えている。本講義では 2 年生までの有機化学の講義内容が基盤となるため早めに復習を促す必要があると考えている。 (5) 昨年度と同様に、有機化学の基礎となる求核置換反応などが授業内容であった。内容が非常に多く、駆け足的に授業を進めざるを得ない講義であるが、大事な点を重点的に指導しシラバスの内容は網羅できたと考えている。授業評価		

アンケートの総合評価は 4.70 であり、現状で授業方法に特段問題はないと考えている。

- (6) 教員持ち回りのオムニバス形式の講義であった。最先端の研究について講義した。
- (7) 教員持ち回りのオムニバス形式で研究室の最先端研究について講義した。
- (8) 研究室の学生二名に対して、英語で記述された論文を読みそれに対して議論または発表を行う講義を行った。
- (9), (10), (11), (12) 卒研究生 2 名、M1 2 名、M2 4 名、D1 2 名、D3 1 名の研究指導を行った。セミナーは、学生に研究に対して幅広い興味を与えることを目指した。研究活動に関して、目標はほぼ達成することができた。学生に英語の文献を積極的に読解させ、有機化学の最先端を学ばせるように努めた。
- (13) 全合成の論文を用い、中間体や反応機構を問う問題を出題し、それに対する解答の添削と関連事項の講義を行った。反応機構に関する問は知識を問うものではなく、理論的に考えることで解答が導き出せる出題を行った。二名の学生が受講したが、学生自身の研究にも生かせる知見を与えることができたと考えている。

その他の特記事項

担当授業科目等		
(全学共通)	(1) 化学 C (教養原論・分担)	3Q 1コマ × 4 回
(学部)	(2) 生物化学 II	前期 1コマ × 15 回
	(3) 化学実験 II (生物化学分野・分担)	後期 2コマ × 15 回
	(4) 特別研究	
	(5) 初年次セミナー (分担)	1Q 1コマ × 3 回
(博士前期)	(6) 生化学特論(分担)	前期 1コマ × 5 回
	(7) 有機化学 II (分担)	後期 1コマ × 5 回
	(8) 論文講究 I、II	
	(9) 特定研究 I、II	
(博士後期)	(10) 特定研究(生命分子化学)	
授業内容と自己評価		
(1) 全学共通・今年度は、すべて対面で授業を行った。文科系学部の学生が履修し、内容は DNA からタンパク質に至るまでの生物化学分野の基本を講義したものである。毎回小レポートと質問を課し、次授業で丁寧に回答解説する工夫をした。元々興味を持つ学生が少ない中、アンケートの総合判断の平均は 3.6 となり、昨年度の 4.0 より低下したが、一昨年の 3.3 よりは向上した。回答者が 7 名と少なく誤差の範囲で変化はないと考えられる。 (2) セメスター制で、前半はタンパク質の構造、後半では機能および酵素反応についての講義を行った。教科書ヴォート「基礎生化学」の該当部分を中心に、構造および酵素については教科書よりも詳細でレベルの高い内容も取り入れた。アンケートの「総合評価」は、は 4.89 であり、昨年度の 4.67、一昨年度の 4.52 から向上し好評であった(回等者 9 名)。アンケートの記述で「生物化学への興味が湧いた」とあった。成績評価は、ほぼ毎回の課題、および対面での期末テストで行った。 (3) 未知の生体分子試料を多数渡し、生化学的実験および物理化学的測定によって、どの分子であるか推測して当てるという「生体分子クイズ」形式で実験を行っている。今年も一部の測定実験を youtube 動画で配信し、実験データを渡して解析をしてもらうこととした。未知の発見という興味を引き立てるテーマであり、意欲的なレポートも散見された。 (4) 4 回生 2 名の研究指導を行った。 (5) 教務委員担当も含め、初年次セミナー 3 回(オリエンテーション、文献検索、レポート課題の作成法)を担当した。 (6) タンパク質分子の構造安定性の熱力学を詳述した。熱容量を含む熱力学的記述と、分子構造と熱力学パラメーターとの相関に至るまで、解析に必要なすべてを示す高度な内容であったが、相当数の学生の理解が進んだと思われ、アンケートの総合評価で 5.0 (回答者 4 名) であった。 (7) 核磁気共鳴(NMR)法の原理とタンパク質構造研究への応用について担当した。大学院の講義は興味のある学生が主体となるため、高いレベルの講義を行っているが、それでも理解できている学生が相当数いた。アンケート回答者はなかった。 (8) 英語による学術論文を選び、学生が紹介発表する際に、内容の論理的理解、英文の解釈法などを個々に懇切丁寧に指導した。 (9) M1 (2 名)、M2 (2 名)の研究指導を行い、修士 3 名が学位を得て卒業に至った。各人の興味を生かしてタンパク質デザインに関する研究テーマを設定し、詳細な測定解析と併せ		

て研究を進展させた。

(10) 博士後期課程の学生1名について研究指導を行い、博士(理学)の学位取得に至った。超高耐熱性を有するペプチドのデザイン戦略、および構造と熱力学物性の測定解析についての指導を行った。

その他の特記事項：教務委員として、高度教養セミナー理学部化学入門、初年次セミナー、科学英語のアレンジととりまとめを担当した。

担当授業科目等		
(全学共通)	(1) 化学実験2 (分担)	4Q 2コマ × 4回
	(2) 初年次セミナー (分担)	1Q 0.3 コマ × 1 回
	(3) 生物化学 I-1	3Q 1 コマ × 7.5 回
	(4) 生物化学Ⅲ-2	4Q 1 コマ × 7.5 回
	(5) 化学実験Ⅱ (分担)	後期 2 コマ × 15 回
	(6) 理学グローバルチャレンジプロ グラム UPLB コース)	4Q 1 コマ × 6 回 +8 日間帯同
(学部)	(7) 高度教養セミナー理学部化学入門 (分担)	3Q 0.3 コマ × 1 回
	(8) 高度教養セミナー理学部 (化学)	前期 1 コマ × 15 回
	(9) 特別研究	
	(10) 生物化学特論 (分担)	前期 1 コマ × 5 回
(博士前期)	(11) 有機化学Ⅱ (分担)	後期 1 コマ × 5 回
	(12) 論文講究 I, II	
	(13) 特定研究 I, II	
(博士後期)	(14) 有機化学Ⅱ特論 (分担)	後期 1 コマ × 1 回
	(13) 特定研究	
授業内容と自己評価		
(1) 錯塩の合成、中和滴定、pH滴定を担当した。冒頭に原理や基本操作の説明を簡潔に行った後に実験に移行することで、限られた時間で効率的に原理の確認を行ったうえでの実験実施を図った。電子テキストに移行したためか、実験ノート作りをしていない学生が見られたため、次年度に改善を図りたい。 (2) 研究紹介を担当し、タンパク質の自己集合反応の概要を述べ、実際に注目している研究テーマについての紹介を行った。 (3) 「ヴォート基礎生化学第5版」を教科書に用いており、アミノ酸、タンパク質、脂質、小分子の膜輸送、糖を扱った。2023年度も演習形式の確認と数回の課題を通して理解促進を心掛け、最終回に期末試験を行うことで理解度を確認した。 (4) 「ヴォート基礎生化学第5版」を教科書に用いており、転写、翻訳、翻訳後修飾、遺伝子発現の調節を扱った。生物化学I-1と同様に、途中で数回の課題と質問の受け付けを行い、最終回に期末試験を行うことで理解度を確認した。 (5) HRP活性測定、Mb実験、PCR実験を実施し、生物化学分野で用いる基礎操作の習得をはかった。TA、SAの協力を得ることで限られた日数で効率的に実施することができた。レポートは、例年に比べて完成度の低いものが見られたため、来年度のレポート指導の課題としたい。 (6) グローバルチャレンジ実習 (理学UPLBコース) は、農学部と合同の形で実施している。理学部からは5名の参加者があり、農学部の参加者21名と共に実施した。事前学修5回で準備を整え、フィリピン大学ロスバニョス校での現地実習を3週間実施し、その後に事後学修1回で振り返りを行った。授業に加え、授業後の現地の大学生との交流、さらに夕食後のセッションを通して英語でのプレゼンやコミュニケーション力が格段に向上し、国際交流への意識が高まったとの声が強かった。 (7) 研究室配属に先立ち、研究室で行う研究の目的や概要の紹介を行った。 (8) 4回生2名とともに輪読会を開催し、英語論文の読み方と研究室内で行っている研究に関わる基本情報の提供を行った。 (9) 4回生2名の研究指導を行った。1年間にわたり実験指導を行い、最終成果を特別研究発表会で発表した。週に1回のグループ内ミーティングと1回の合同ゼミを行い、グループ内ミーティングでは、定期的にレジメを作成しプレゼンすることで、着実に研究進行するための手助けとした。合同ゼミは、木村准教授のグループと行い、自身の研究テーマのみならず、タンパク質研究に関する幅広いトピック		

クスに触れられるようにした。 (10)タンパク質フォールディングの速度論に関する講義を行った。フォールディング、アンフォールディング速度論的解析の理論および実験方法、さらに遷移状態の構造特徴を解説した。 (11)生体内の混雑環境、さらにそこで進行するタンパク質の凝集を回避しながらのフォールディング、さらに凝集が起きた場合の品質管理機構について解説し、タンパク質に関連した専門的かつ時事的なトピックスを共有した。 (12)木村准教授のグループとの合同ゼミ形式で定期的な文献紹介を行った。タンパク質研究の動向や解析技術に関する最新情報を共有するだけでなく、さらに参加者同士の議論を通して、研究の質や課題を客観的に捉える訓練にもなったと考えている。 (13)個別の実験指導に加え、グループ内ミーティングで毎週進捗状況の共有と議論を行いながら研究を進めた。学会にも参加し、2023年度は、国内学会で計5件の発表を行った。このほか、M1の学生1名が研究経過発表会での発表を行い、M2の学生2名が最終成果を2月に修士論文としてまとめ発表した。 (14)履修者にセミナー形式で発表を行ってもらい、履修者の研究紹介と議論を行った。質疑応答を通して研究に関する議論を深めることができた。
その他の特記事項

担当授業科目等					
(全学共通)	(1) 化学実験 2 (分担)	4 Q	2 コマ	×	4 回
	(2) 初年次セミナー (分担)	1 Q	0.3 コマ	×	1 回
(学部)	(3) 分析化学 I-1, I-2	3, 4 Q	1 コマ	×	各 8 回
	(4) 生物化学 I-2	4 Q	1 コマ	×	8 回
	(5) 生物化学Ⅲ-1	3 Q	1 コマ	×	8 回
	(6) 化学実験Ⅱ (分担)	後期	2 コマ	×	1 5 回
	(7) 高度教養セミナー理学部化学入門 (分担)	3 Q	0.3 コマ	×	1 回
	(8) 高度教養セミナー理学部 (化学)	前期	1 コマ	×	1 5 回
	(9) 特別研究				
(博士前期)	(10) 生物化学特論 (分担)	前期	1 コマ	×	5 回
	(11) 有機化学Ⅱ (分担)	後期	1 コマ	×	5 回
	(12) 先端融合科学特論 A(化学) (分担)	1 Q	1 コマ	×	3 回
	(13) 論文講究 I, II				
(博士後期)	(14) 特定研究 I, II				
	(15) 有機化学特論Ⅱ (分担)				
授業内容と自己評価					
(1) 化学物質の合成および定量分析についての実験指導を理学部科学科学生に対して行った。概要説明等の事前準備等について、学生の理解度に合わせて個別指導を行えるように準備をし、確認テストによって理解度をはかった。取り扱われた化学反応や操作方法を良く理解できたと期待される。 (2) 対面形式で研究紹介を担当し、生体高分子のダイナミクス研究に関する重要性和実際の研究方法について述べ、現在遂行している研究についての紹介を行った。 (3) ハイブリッド形式で講義を行い、I-1とI-2ともに試験による成績評価を行なった。前年度までと同様の内容(化学平衡、沈殿生成、データの統計学的取り扱い等)に加えて、酸化還元反応について、式変形のみならず、化学における変数の持つ意味について理解されたと期待される。 (4) ハイブリッド形式で行なった。「ヴォート基礎生化学第5版」を教科書に用いて、第14章/代謝～第19章/光合成を担当した。教科書の内容を理解すると同時に、酵素反応を熱力学に基づいて理解できるように心がけた。8割弱の学生が有益であったと判断しており、生命分子化学における物理化学の重要性について理解されたと考えられる。 (5) 「ヴォート基礎生化学第5 (もしくは4) 4版」を教科書に用いて、第24章/DNAの構造と第25章/DNAの修復を担当した。教科書の内容を理解すると同時に、最先端の内容も盛り込むことで生物化学の進歩を理解できるように心がけた。また、スライドの図を英語で作成することで、英語と日本語両方を抵抗なく学習できるようにした。7割以上の学生が理解を深め、有益だったと判断しており、生命分子化学の先端研究に関する紹介も含めた発展的授業を進めていきたい。 (6) 3年生に生物化学分野の学生実験を行い、脱水素酵素による基質の酸化反応についての速度論的解析を行った。詳細な実験マニュアルを作成し、実験結果の生データを履修学生に配布した。この実験は生物化学的に重要なミカエリス・メンテン型の速度論的解析について習熟できるように実験課題を作成したものであり、紫外・可視吸収分光器およびマイクロプレートリーダーを用いて実験を行い、各測定結果を比較できるようにした。また理解を深めるために、理想的な測定データも同時に提供することで、演習形式の解析課題を設定し、実験レポートの一部として提出させた。また、イオン交換クロマトグラフィーを用いたタンパク質精製について実験を行った。表面電荷の異なる3種類以上のタンパク質の混合溶液を陽イオン交換カラムにアプライし、溶媒のイオン濃度を変化させることで段階的に溶出させ、紫外・可視吸収スペク					

トル、蛍光スペクトル測定によって同定させた。用いるタンパク質を補欠分子族あるいは蛍光発色団を持つものとする事で、目視でも分離を確認できるよう、学生が興味を持って実験できるように工夫を行った。 (7) 4年生進級時の配属希望研究室を選定する際の情報提供を行うため、現在グループで行われている研究の背景と実際の結果についての紹介を行った。 (8) 英語論文を参考文献として、現在研究グループで行われている研究の背景を解説するとともに、論文の読み方や参考文献の参照方法を説明するために4年生2名と他の研究室構成員（M1:2名，M2:2名）を含めた輪読会を開催した。 (9)，(13)，(14) B4:2名，M1:2名，M2:2名の研究指導を行った。グループメンバー全員参加の形式で、研究発表と論文紹介に加え実験の進捗状況報告をグループ内で毎週毎週1-1.5コマ相当行うことで実験結果と実験方針について議論する場を持ち、他の構成員の研究内容についても把握できるように努めた。加えて、週1回のラボセミナーは、茶谷准教授のグループと合同で行い、タンパク質研究あるいは種々の分光学的測定に関する幅広い分野に関する知識を習得する機会を提供した。学生間での議論、セミナー等での積極的な発言を促すように心がけた。 (10) 生体分子のデザイン及びタンパク質の構造予測法に関する講義を行い、最新の論文を用いて、現在のタンパク質デザイン研究について学生に発表をし、議論を深めることでアクティブラーニングを行えるように工夫をした。 (11) 生体分子のみならず分子同士の結合における、平衡定数（解離定数）および実験的に観察される速度定数の算出方法についての講義（5回）を行った。式変形だけでなく、実際の実験におけるパラメーターの導出に至るまでの話をする事で、より実践的な講義になるように心がけた。試験を行うことで理解度について計った。 (12) 最先端の時間分解測定法と原子分解能解析法についての講義を行い、先端科学によって明らかにされる分子間相互作用について学生が理解できるように心がけた。レポートによって、各自の行う研究に対してこれらの測定法がどのような波及効果を持つかについて考察させることで、理解度をはかった。また、COVID-19に関するウイルスの増殖機構と、その原因ウイルスであるSARS-CoV2のスパイクタンパク質やヒト受容体であるACE2受容体についての最新研究を紹介し、ウイルスの感染機構についての生物化学的研究に興味を持てるように心がけた。 その他の特記事項

担当授業科目等			
(学部)	(1) 化学実験Ⅰ(分担)	前期	2コマ × 6回
	(2) 有機化学Ⅱ-1, Ⅱ-2	前期	1コマ × 16回
	(3) 有機化学Ⅲ-1, Ⅲ-2	後期	1コマ × 16回
	(4) 有機構造化学1, 2	1Q	1コマ × 8回, 2Q 1コマ × 8回
	(5) 特別研究		
(博士前期)	(6) 特定研究Ⅰ、Ⅱ		
	(7) 論文講究Ⅰ、Ⅱ		
(博士後期)	(8) 特定研究		
	(9) 有機化学特論Ⅰ(分担)		
授業内容と自己評価			
(1) 化学実験Ⅰ：有機化学における物質の合成、精製、同定に関する基本操作の習得を目指した。それぞれの実験で生じる現象を、化学反応から理解できるように説明を行った。実験の解説や操作に関するビデオを作成し、一部をオンデマンド形式での実験指導を行った。 (2) 有機化学Ⅱ：ボルハルトショアー(上・下)の14, 15, 16, 22章の解説を実例を交えて行った。PPTによるスライド形式での講義メリットを活かし、より多くの演習問題を取り入れて、習熟度の向上を図った。 (2) 有機化学Ⅲ：ボルハルトショアー(下)の17, 18, 19, 20, 21, 23章の解説を実例を交えて行った。PPTによるスライド形式での講義メリットを活かし、より多くの演習問題を取り入れて、習熟度の向上を図った。 (3) 有機構造化学：(1) 有機工業化学を教科書として、有機化学の原料(石油、天然ガス、石炭)とアウトプット(有機化学産業)について講義を行った。(2) 基礎高分子科学を教科書として、基礎的な高分子化学を解説した。最近の化学産業に関する新聞記事などを取り上げ、日本を代表する化学企業の主力製品について理学的な視点から解説を加えた資料を作成して、動画や写真などを多用して解説を行った。 (5)(6)(8) 特別研究：B4(2名)、特定研究：M1(2名)、M2(3名)、D2(1名)の研究指導を行った。当グループと複数の化学系企業との産学共同研究に学生を参画させることによって、基礎研究に加えて、社会における実践的な基礎研究と応用研究、そして国際的および経済的な視点からの研究経験が身につくように教育を行った。当グループが推し進める産学医官共同研究および国際共同研究は、学生の研究能力と学習意欲を向上させ、視野を大きく広げることができ、また研究室に最先端の機器や安全装置などを導入できるメリットがある。また、経済的に研究・教育活動の支援を可能とするため、学生のアクティビティを向上させる効果が観られている。次年度以降もこの方針で教育活動を行う。 (7) 論文講究Ⅰ、Ⅱ：定期的な文献紹介を行い、当該研究分野の動向に関する情報共有や議論を行った。また、研究に関連する最近の論文紹介を適宜行い、研究動向の把握を促した。 (7) 有機化学特論：分子間力に関する講義とそれに関する実験テクニック、および機器分析の原理と解析について、詳しい説明を交えて講義した。 (8) 有機化学特論Ⅰ：受講者の研究課題について、本学の他の研究グループとの共同研究の可能性を検討するように促す課題を与えた。			

担当授業科目等				
(全学共通)	無し			
(学部)	無し			
(博士前期)	構造解析学 (分担)	前期	1 コマ	× 5 回
(博士後期)	構造解析学特論 (分担)	前期	1 コマ	× 5 回
授業内容と自己評価				
・結晶学、X 線回折法による原理、測定及び構造解析、放射光 X 線回折による精密構造解析手法について解説した。また、シンクロトロン放射光の高輝度、高エネルギー X 線を用いた精密構造解析により解明された新奇・機能性物質の実例についても解説した。本年度の座学の講義は全て Zoom による遠隔授業であったが、現地授業として SPring-8 の見学を実施することによって、授業で説明した研究に用いた装置を実際に身近に観ることができ、学生も満足していると思われる。				
その他の特記事項				

担当授業科目等				
(全学共通)	無し			
(学部)	無し			
(博士前期)	構造解析学 (分担)	前期	1 コマ	× 5 回
(博士後期)	構造解析学特論 (分担)	前期	1 コマ	× 5 回
授業内容と自己評価				
・構造解析学および構造解析学特論の講義では、放射光発生のお考え方や X 線イメージングに関する基本的な説明を行った。上杉が担当する講義は全て Zoom による遠隔授業であったが、受講者からの質問や疑問に対して、なるべくその場で検討し回答をすることで、臨場感のある状態を作り出せたのではないかと考える。受講者からはいくつか質問が寄せられており、講義内容に興味を持ってもらえたと考える。 SPring-8 で行った現地授業のうち見学に関しては、物珍しさもあるせいか、受講者からは多くの質問が出た。講義では、SPring-8 で実施した小惑星リュウグウ試料の分析に関する解説を行った。比較的興味を持って頂いたようで、質問が複数寄せられた。現地授業はおおむね成功したのではないかと考える。				
その他の特記事項				

担当授業科目等				
(全学共通)	無し			
(学部)	無し			
(博士前期)	構造解析学 (分担)	前期	1 コマ	× 5 回
(博士後期)	構造解析学特論 (分担)	前期	1 コマ	× 5 回
授業内容と自己評価				
・ X 線吸収分光法、蛍光 X 線分析、X 線顕微鏡について、原理、測定方法および構造解析手法について解説した。また、シンクロトロン放射光の高輝度、高エネルギー X 線を用いた X 線顕微分光法 (X 線吸収分光と X 線顕微鏡の組み合わせ) の最新の研究成果についても解説した。本年度の座学の講義は全て Zoom による遠隔授業であったが、現地授業として大型放射光施設 SPring-8/SACLA の見学も行い、授業で説明した研究に用いた装置を実際に身近に観ることができて、学生も満足していると思われる。				
その他の特記事項				

担当授業科目等			
(全学共通)	無し		
(学部)	無し		
(博士前期)	理論生物化学	前期	1 コマ × 10 回
(博士後期)	理論生物化学特論	前期	1 コマ × 10 回
授業内容と自己評価			
・物質科学や生命科学の基礎をなす学問であり材料設計や創薬に重要な役割を果たす量子化学とそのシミュレーションについて講義した。特に、量子化学計算の中心的な役割を担っている分子軌道法を中心に添えて、基本から理解できるように説明した。また、最近の量子化学の計算方法や理論についても講義を行い、実験が主流の化学において量子化学の先端研究がどのように役立つかを学生に伝えることに重点を置いた。また、計算科学技術の最先端に触れることを目的に、スーパーコンピュータ「富岳」の施設見学を行った。			
その他の特記事項			

担当授業科目等			
(全学共通)	無し		
(学部)	無し		
(博士前期)	理論生物化学	前期	1 コマ × 2 回
(博士後期)	理論生物化学特論	前期	1 コマ × 2 回
授業内容と自己評価			
授業ではまず量子化学の手法 (Hartree-Fock, 密度汎関数法 (DFT), Møller-Plesse t 摂動法など) の計算量と精度のトレードオフについて概説した. 富岳における高並列計算は気相のため, Hartree-Fock-Roothaan 方程式とガウス型基底関数について説明した. 次に計算科学について講義した. 量子化学計算ソフトウェアがどのように実装されているかについて, プログラミング言語や数値型 (浮動小数点数) の内部表現, 丸め誤差, オーバーフローなどについて解説した. 量子化学計算は究極的には行列の対角化のため, 線形代数とライブラリーBLAS/LAPACK, さらには疎行列表現について説明した. 最後に富岳における最新の研究, シリコン量子ドットの DFT 計算のベンチマーク, について紹介した. 神戸大学化学専攻のカリキュラムについて詳細を把握していないが, 計算科学についてあまり履修していないとのことだったので, その点に重点を置いた. 履修状況や授業アンケートなどのフィードバックがあれば内容を改善できると思われる.			
その他の特記事項			

担当授業科目等			
(全学共通)	無し		
(学部)	無し		
(博士前期)	理論生物化学	前期	1 コマ × 2 回
(博士後期)	理論生物化学特論	前期	1 コマ × 2 回
授業内容と自己評価			
当該非常勤講師は1コマ目の冒頭に、自らの研究が究極には化学反応のシミュレーションそして化学反応の設計と制御を目指していることを、そのために電子状態計算方法におけるジレンマを克服せねばならないことを述べた。その上で現行の電子状態計算方法の俯瞰図を示し、その事実上の原点であるハートリー＝フォック理論(Hartree-Fock Theory)より順次特徴と問題点を説明した。そして当該非常勤講師が取り組んでいる結合クラスター法(Coupled Cluster Method)の改良によるジレンマ克服の方向性を示した。さらに、量子化学の研究分野の細分化が進んだための難しさを指摘して、基礎研究に携わるにも出口を常に思い描きながら小分野を横断する姿勢が重要との私見を示して1コマ目を終えた。 2コマ目ではフェムト秒の時間分解能で化学反応を追跡する実験方法を紹介して、現行の理論と実験の組み合わせでなされている化学反応の素過程の解明の現状を示した。現在は、星間物質で起こっているような小さな孤立分子の光化学反応はおおむねシミュレーションも実験も可能なこと、現実のほとんどの化学反応が行われる溶液系への理論と実験技術の拡張が最先端であることを述べて2コマ目の本題を終えた。残り時間では当該非常勤講師自らの経験をいかして海外研究留学を望む者に向けてノウハウを説明した。 量子化学の最先端の研究はそれを専門としない大学院生にとって理解が難しいと思われるが、当該非常勤講師は自らの実験家との共同研究の経験をいかして少なくとも応用研究とのつながりがわかるように講義できたと思われる。また最後の余談は、仮に海外研究留学の望む者が出席者のうちにいれば有用であったと思われる。			
その他の特記事項			

(全学共通)	無し				
(学部)	無し				
(博士前期)	科学英語1, 2 (化学専攻)	後期	1 コマ	×	1 5 回
	科学英語1, 2 (生物学専攻)	後期	1 コマ	×	1 5 回
(博士後期)	無し				
授業内容と自己評価					
本講義で学生が以下①～⑥を身につけられるように、科学論文というジャンルの語学的側面から捉えるように講義を行った。さらに学生に気付きを促し、気付きから得たことが論文執筆、プレゼンテーションのような課題に実際に適用できるよう指導した。コースが終了するころには大部分の学生が目標を達成しており、学生の本科目におけるモチベーションは高かったようだ。 ①英語で書かれた資料のサーチ・スキルを身につける。 ②学術論文の定型構成要素を習得する。 ③各自の用途に合った語学データベースが作ることができる。 ④定型構成要素の知識を踏まえ、データベースを用いて論文の執筆、推敲ができる。 ⑤英語で学術プレゼンテーションができる。 ⑥他の学生が書いた英作文を建設的に批判し、また、他の学生からの批判を有効利用できるようになる。					
その他の特記事項 授業は対面で実施した。					