

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年 4月 28日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 静岡大学・学術院理学領域
 職 名 教授
 研究代表者名 松本正茂

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04001)

1. 共同利用研究 課題名	多重極限テラヘルツ ESR による $\text{Sr}_2\text{CoSi}_2\text{O}_7$ の磁気励起の研究			
2. 共同利用研究 目的	多重極限テラヘルツ ESR を利用した $\text{Sr}_2\text{CoSi}_2\text{O}_7$ の強磁場における多様な磁気励起モードの探査に関して、理論部分を担当して共同研究を推進する。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年 6月 1日 ~ 令和5年 3月 31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 松本正茂	静岡大学 学術院理学領域	教授	実験の解析	
(分担研究者)				
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ物性物理学研 究部門	氏 名	太田仁・大久保晋

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

(課題番号:R04001)

6. 共同利用研究計画

オケルマナイト $\text{Sr}_2\text{CoSi}_2\text{O}_7$ では Co が磁性を担っている。一方、Co サイトは空間反転対称性を持たないため、スピン演算子の積で定義されるスピン四極子が電気双極子を誘発する。非相反な光応答もこれが原因で観測されている。神戸大学分子フォトサイエンス研究センターで観測された ESR について量子論的計算を駆使して解析し、磁場中の励起モードの特性を解明した結果、令和 3 年度において非相反な光応答の理解が進んだ。令和 4 年度はこの研究をさらに進める計画である。新型コロナウイルスの影響で往来ができない場合は、議論をオンラインで行うことで研究を進めることも検討する。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

オンラインディスカッション 4 回

測定結果を再現する物理的な原因について、検討を行った。

8. 共同利用研究の成果

$\text{Sr}_2\text{CoSi}_2\text{O}_7$ において観測されている非相反な現象について、当初原因であると考えていた 2 マグノン励起で解析すると、観測されていた強度よりも 2 桁以上小さいことがわかった。そのため、1 マグノン励起に基づき、マグノン間相互作用を取り入れて再計算した結果、測定結果を定性的に説明できることがわかった。この結果に基づいて、現在、学術論文の作成を進めている。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出して下さい。)

現在、学術論文の執筆に着手している段階である。

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和4年 5月16日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 兵庫県立大学・大学院理学研究科
 職 名 教授
 研究代表者名 坂井徹

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04002)

1. 共同利用研究 課題名	フラストレーション系の量子相転移の研究			
2. 共同利用研究 目的	量子ゆらぎの強いフラストレーション系において、メカニズムの異なるスピギャップ相間の量相転移が理論予測されて注目されている。この量子相転移を圧力等により引き起こし、電子スピン共鳴によって観測する検証実験の実現を目指す。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年6月1日 ~ 令和5年3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役割分担	
(研究代表者) 坂井 徹	兵庫県立大学大学院理学 研究科	教授	数値解析	
(分担研究者) 岡本清美	兵庫県立大学大学院理学 研究科	客員研究員	理論解析	
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ物性物理学 研究部門	氏 名	太田仁 教授 大久保晋 准教授

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

6. 共同利用研究計画

最近電子スピン共鳴で観測された圧力誘起相転移が、本当に理論予測されている直行ダイマー状態からプラケッ
ット・シングレット相への量子相転移であるかどうかを確認するため、まず電子スピン共鳴の選択則を理論的に導
出する。ここでは、ジャロシンスキー・守谷相互作用の存在により引き起こされる禁制遷移の観測が利用されてい
るので、この状況における電子スピン共鳴の選択則を数値解析と理論解析により求め、太田グループによる実験
結果の詳細なデータを提供していただき、比較を試みる。必要があれば、追実験を依頼する。

このあと、坂井グループが提唱している新しい量子相転移における電子スピン共鳴の選択則の導出を行い、新
しい検証実験の提案につなげる。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

坂井が神戸大学を訪問し、太田氏、大久保氏とディスカッションをしたほか、岡本を交えてのオンラインディ
スカッションを3回行った。

8. 共同利用研究の成果

直交ダイマー系にジャロシンスキー守谷相互作用が存在する場合について、坂井の有限サイズクラスター
の数値解析と岡本の理論解析により、厳密なダイマー相からプラケッ
ット・シングレット相への量子相転移が起
きる場合の、電子スピン共鳴(ESR)禁制遷移の角度依存選択則の変化を導出した。すでに太田グループの
圧力下 ESR 測定で発見されている圧力誘起相転移が、この量子相転移に相当することを確認するため、今
回導出した選択則の変化をどのように実験的にとらえるかについて、現在議論を進めている。

また、モデルの相互作用パラメータをさらに変化させると、別のスピン・ギャップ相への量子相転移が起き
ることも理論予測しており、今後の検証実験の提案に向けて、世界最大規模の数値解析により、高精度な相
境界の導出を行った。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さ
い。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出してください。)

T. Sakai, R. Furuchi and H. Nakano: Quantum Phase Transition of the Shastry-Sutherland System and ESR
Forbidden Transition, 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29), August 18-24, 2022,
Sapporo.

H. Nakano and T. Sakai: Large-Scale Numerical Diagonalization Study of the Shastry-Sutherland Model, 29th
International Conference on Low Temperature Physics (LT29), August 18-24, 2022, Sapporo.

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等
がありましたらご記入ください。

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和4年 5 月 2 日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 神戸大学・大学院科学技術イノベーション研究科
 職 名 准教授
 研究代表者名 中川敬三

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04003)

1. 共同利用研究 課題名	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			
2. 共同利用研究 目的	二次元ナノシート材料を利用した革新的光触媒膜の創製に向けて、異種ナノシート界面で起こる現象の解明は必要不可欠である。本共同利用研究において蛍光挙動を詳細に解析し、ナノシート積層型光触媒膜の光触媒機能の向上を目指す。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年6月1日～令和5年3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 中川 敬三	神戸大学大学院科学技術イノベーション研究科/先端膜工学研究センター	准教授	研究総括, 積層膜作製, 光触媒機能評価, 蛍光測定	
(分担研究者)				
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	レーザー分子光科学研究部門	氏 名	立川 貴士

※次ページの6～10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6～10の項目全体では1頁に収めて下さい。

6. 共同利用研究計画

ニオブ酸ナノシート(HNb_3O_8)とカーボンナイトライドの一種である $g\text{-C}_3\text{N}_4$ を利用して作製した $\text{HNb}_3\text{O}_8/g\text{-C}_3\text{N}_4$ 複合積層膜が、有機物の高い光分解活性を有することがわかっている。蛍光スペクトル測定を行ったところ、 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ の蛍光強度は HNb_3O_8 の添加に伴い減少し、さらに平均蛍光寿命がナノ秒オーダーで短くなることが明らかとなっている。これはバンド構造より励起種の効率的な分離が起こり、再結合が抑制され、高い光触媒活性に寄与していることが考えられる(K. Nakagawa et al., *Chem. Eng. J.* 442, 136254, 2022 (受入研究者である立川教授と共著))。今後、異なるナノシートを利用することでより効果的な電子移動が期待される。

本共同利用研究では、時間分解単一分子顕微分光装置を利用し、カーボンナイトライドの種類の変化($g\text{-C}_3\text{N}_5$, $g\text{-C}_3\text{N}_6$ 等)、また酸化グラフェン等の電子伝導性の高いナノシート材料を複合した場合の蛍光挙動への影響について検討する。具体的には、倒立型蛍光顕微鏡を備えた広視野/共焦点顕微鏡システムを用いて蛍光測定を行う。特に、共焦点光学系を用いることで、ターゲット領域上の約 $1\mu\text{m}^2$ の領域を空間的に選択して発光寿命およびスペクトルを取得することができる。事前にメール等により実験計画の詳細について打ち合わせを進め、訪問測定をさせて頂く予定である。また、キャリアダイナミクスの解明や過渡種の特定に有効な時間分解テラヘルツ分光装置や時間分解EPR分光装置等の活用を含めた研究への展開を目指し、研究計画を関係研究者(富永圭介教授、小堀康博教授など)と議論する。(使用設備等:時間分解単一分子顕微分光装置)

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)
12月6日(火)15時~17時 レーザー分子光科学研究部門 立川 貴士 教授の研究室にて、時間分解単一分子顕微分光装置を利用した蛍光測定を行った。

8. 共同利用研究の成果

本研究ではさらなる性能向上を目的として、 $\text{HNb}_3\text{O}_8/g\text{-C}_3\text{N}_4$ 複合積層膜に酸化グラフェン(GO)を導入した。光触媒の面では GO は電子移動の促進により、励起電子の再結合の抑制に寄与することが報告されている。本研究では、 $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{HNb}_3\text{O}_8$ 複合膜の光触媒性能と分離性能に及ぼす GO 添加の影響について検討した。膜性能は、GO を添加することで、アニオン性色素である Acid Red265 (Mw: 635.6) の阻止性能を 48%から 71%まで高めることができた。一方、各膜の光触媒活性を評価したところ、単独のナノシート膜と比較して、複合化により光触媒活性は増大し、rGO を微量(0.05wt%)添加した複合膜は $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 膜の 2.5 倍の光触媒活性を示した。rGO の添加効果を調査するため、励起波長 405 nm にて蛍光測定を行った。 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ 試料と $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{GO}$ 複合試料にて比較したところ、蛍光スペクトルの形状は大きな違いは見られず、また蛍光寿命は $g\text{-C}_3\text{N}_4$ の粒子サイズに依存し、rGO 上での顕著な蛍光消光は見られなかった。蛍光顕微鏡観測において $g\text{-C}_3\text{N}_4$ が大きく凝集していることが確認され、これが $g\text{-C}_3\text{N}_4$ の蛍光寿命や膜性能に影響していると考えられる。今後、 $g\text{-C}_3\text{N}_4$ の剥離度を向上させ、再検討を行いたいと考えている。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出してください。)

学会発表

- “ $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{HNb}_3\text{O}_8$ ナノシート複合型光触媒膜の光触媒活性に及ぼす酸化グラフェン添加の影響”, 森口 佳奈, 中川 敬三, Hu Chechia, 立川 貴士, 岡本 泰直, 松岡 淳, 神尾 英治, 北河 亨, 吉岡 朋久, 松山 秀人, 第 25 回化学工学会学生発表会, 2023 年 3 月 4 日(土), オンライン開催

10. 共同利用研究に関連した受賞, 博士学位論文の取得, 大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

特になし

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年 4月 30日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 横浜国立大学大学院工学研究院
 職 名 准教授
 研究代表者名 伊藤 傑

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04004)

1. 共同利用研究 課題名	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			
2. 共同利用研究 目的	本共同利用では、機械的刺激を加えることで発光特性が変化する各種メカノクロミック発光性ソフトクリスタルについて、単一粒子レベルでの蛍光特性や蛍光寿命測定を行うことで、メカノクロミック発光の機構について知見を得ることを目的とする。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年 6月 1日 ~ 令和5年 3月 31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 伊藤 傑	工学研究院	准教授	研究統括、解析	
(分担研究者) 八木 匠 森山 裕歩	理工学府 理工学府	M2 M1	サンプル合成、解析 サンプル合成、解析	
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	レーザー分子光科学	氏 名	立川 貴士

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

<p>6. 共同利用研究計画</p> <p>令和4年度の共同利用研究では、申請代表者らが令和3年度に見出した(1)機械的刺激付与後に種々の有機溶媒に曝露すると異なる発光色に変化する有機ソフトクリスタル、および、(2)電子ドナー(D)部位と電子アクセプター(A)部位をアルキルスパーサーで連結した非共役D-A型有機ソフトクリスタルのメカノクロミック発光(MCL)を対象として、時間分解単一分子顕微分光装置を用いた蛍光スペクトルおよび蛍光寿命の測定と解析を行うことで、両者のMCLの機構を解明することを目的とした。両サンプルは取り扱いに熟練を要するため、取り扱いに習熟している2名の分担研究者が申請代表者とともに受入研究者のもとを訪問し、両サンプルを用いた測定・解析の条件について詳細に議論することを計画した。</p>
<p>7. 共同利用研究の実施状況</p> <p>(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)</p> <p>2022年10月25日(火)~26日(水)の2日間にわたり、研究代表者および分担研究者1名が受入研究者を訪問した。ピリジン分子を包接したMCL性ソフトクリスタルおよび非共役D-A型MCL性ソフトクリスタルの塩酸蒸気曝露前後や機械的刺激付与前後の各状態について、時間分解単一分子顕微分光装置を用いた一粒子観測と蛍光寿命測定を行うとともに、得られた実験結果について議論した。</p>
<p>8. 共同利用研究の成果</p> <p>令和4年度の共同利用研究では下記の成果を得た。</p> <ol style="list-style-type: none">1. ピリジン分子を包接することで塩酸蒸気曝露時に発光色が緑色から橙色に変わるMCL性ソフトクリスタルの蛍光顕微鏡観察により、塩酸蒸気曝露後の結晶表面は主に橙色発光を示すが、一部に緑色発光を示す領域が存在することを確認した。一方、塩酸蒸気曝露後に粉碎した試料では、大部分が緑色発光を示したが、一部が弱い橙色発光を示した。また、蛍光寿命を測定した結果、塩酸蒸気曝露後に粉碎すると、結晶状態の寿命よりも短寿命となることが分かった。すなわち、プロトン化されたピリジン分子と発光性分子が相互作用すると無輻射失活過程の寄与が増大することが示唆された。2. 分子間相互作用に基づきMCLを示すと考えられる2種類の非共役D-A型ソフトクリスタルについて、機械的刺激付与前後の発光状態を蛍光顕微鏡により観察するとともに、それぞれの短波長領域と長波長領域の発光について蛍光寿命を測定、解析した。また、両化合物のドナー部位およびアクセプター部位に相当する2分子の混合物についても蛍光顕微鏡観察と蛍光寿命測定を行い、単一化合物と混合物の結果を比較することで、MCLにおける分子間エネルギー移動に関する知見を得た。
<p>9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況</p> <p>(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出してください。)</p> <p>令和4年度は、令和3~4年度の共同利用研究成果を3報の論文として発表し、2件の学会発表を行った。</p> <ol style="list-style-type: none">1) Yoshida, R.; Tachikawa, T.; Ito, S. "Extension of the mechanoresponsive luminescence shift via formation of a doped organic crystal" <i>Chem. Commun.</i> 2022, 58, 6781–6784.2) Kubota, R.; Yuan, Y.; Yoshida, R.; Tachikawa, T.; Ito, S. "Tunable mechanochromic luminescence via surface protonation of pyridyl-substituted imidazole crystals" <i>Mater. Adv.</i> 2022, 3, 5826–5835.3) Yagi, T.; Tachikawa, T.; Ito, S. "Solvates of a dianisyl-substituted donor–acceptor-type benzothiadiazole: mechanochromic, vapochromic, and acid-responsive multicolor luminescence" <i>CrystEngComm</i> 2023, 25, 2379–2389.4) 吉田遼平、立川貴士、○伊藤傑、「チエニルベンゾチアジアゾール結晶のメカノクロミック発光制御」、『第32回基礎有機化学討論会』、1C03、京都パルスプラザ、京都、2022年9月20日5) ○八木匠、立川貴士、伊藤傑、「ドナー・アクセプター型ベンゾチアジアゾール誘導体の擬多形結晶による発光クロミズム」、『第1回ソフトクリスタル研究会』、P-02、鎌倉商工会議所、神奈川、2022年11月19日
<p>10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。</p> <ol style="list-style-type: none">1) 伊藤傑、2022年度光化学協会奨励賞、「刺激応答性有機発光体の構造開拓と機能革新」、光化学協会、2022年9月14日

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年 4月 28日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 徳島文理大学・理工学部
 職 名 教授
 研究代表者名 國本 崇

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号: R04005)

1. 共同利用研究 課題名	植物栽培用蛍光材料のテラヘルツ ESR による発光イオンの電子状態解析			
2. 共同利用研究 目的	植物栽培に利用可能な深赤色発光材料のテラヘルツ ESR 測定を行い、個々のイオンの電子状態ならびに磁氣的相互作用を明らかにし、発光の高輝度化およびスペクトル調整のための基礎的知見を得る。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年 6月 1日 ~ 令和5年 3月 31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役割分担	
(研究代表者) 國本 崇	徳島文理大学理工学部	教授	研究総括・実験・解析	
(分担研究者)				
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ物性物理学研 究部門	氏名	太田仁、大久保晋

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

(課題番号: R04005)

6. 共同利用研究計画

先行の研究課題で行ってきた Eu^{2+} および Mn^{2+} を高濃度添加した蛍光材料では exchange-narrowing でマージされた吸収を分裂できるテラヘルツ強磁場 ESR 測定を低温で実施する。
新たな試料として Cr^{3+} , Mn^{4+} , Fe^{3+} を発光中心とする蛍光材料の ESR 測定によるイオンの電子状態解析を想定している。これら新規の試料については SQUID 磁束計による磁化率温度変化測定を行い磁気転移が生じるか否かを押さえておく。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)
実験室の改修、強磁場用装置の改修の都合により実験は未実施である。オンラインおよび学会会場においてディスカッションを計 3 回行った。

8. 共同利用研究の成果

Eu/Mn を高濃度添加した蛍光材料については実験条件を再度詰め、また 55T マグネット用のクライオスタット準備状況を確認した。高周波光源でのテストを依頼し、準備が進行している
新たな試料としてスピネル構造を持つ母体に Cr^{3+} , Mn^{4+} , Fe^{3+} を添加した試料を合成しているが、単相で得られていないため、実験を行うには不十分であるという結論になっており、再度文理大学での準備を進めた。 Cr^{3+} を添加した LiAl_5O_8 について錯体重合法により単相と考えられる試料を得ることができており、次年度実験を行う予定にしている。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくと記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出して下さい。)

なし

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

なし

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和4年 4月 30日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 千葉大学・大学院理学研究院化学研究部門
 職 名 准教授
 研究代表者名 城田 秀明

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04007)

1. 共同利用研究 課題名	シンプルな液体・溶液のテラヘルツ領域の分極と双極子応答の比較		
2. 共同利用研究 目的	構造がシンプルな液体・溶液のテラヘルツ波の吸収スペクトルの測定を行うことで、ラマン散乱スペクトルとの相違を明らかにする。		
3. 共同利用研究 期間	令和4年6月1日 ~ 令和5年3月31日		
4. 共同利用研究組織			
氏 名	所属部局等	職名等	役割分担
(研究代表者) 城田 秀明	千葉大学大学院理学研究院	准教授	研究立案・実験・研究総括
(分担研究者) 安藤 雅俊	千葉大学大学院融合理工学府	博士3年	実験・解析
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ分子化学研究部門	氏 名 富永 圭介

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

6. 共同利用研究計画

当初の研究計画では、以下の点に注目して計画を立てた。対象となる液体・溶液の測定条件、特にセルの光路長、について検討する。スムーズに実験条件を決定できれば、サンプルの測定を行う。本研究では分子間振動に特に注目するため、サブテラヘルツ時間領域分光装置とテラヘルツ時間領域分光装置によるスペクトル測定を計画しているが、得られた結果によっては、ベクトルネットワークアナライザによる低周波数領域の液体・溶液の構造・配向緩和の測定、far-IR による分子内振動・分子間水素結合を網羅した高周波数領域の測定についても検討する。一方で、以前から継続して共同研究を行っていたイオン液体に関する成果を論文としてまとめられる段階となっていたため、イオン液体に関する研究にシフトすることとした。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

神戸大訪問(安藤雅俊, 6/30): THz-TDS データ確認, 取りまとめの議論

オンラインディスカッション 3 回(フェムト秒ラマン誘起カー効果分光(fs-RIKES)と THz-TDS の結果とスペクトル解釈に関する議論, MD シミュレーションの結果(分子科学研究所石田博士による)を含めた議論, 論文作成に関する議論)

8. 共同利用研究の成果

以前から行ってきた共同研究において、ホスホニウム型イオン液体におけるテラヘルツ領域の fs-RIKES による分極率応答(千葉大学で測定)と THz-TDS による双極子応答のスペクトル(神戸大学で測定)について分子間振動を完全に網羅したものを得て、それらのスペクトル形状が大きく異なることを初めて明らかにしてきた。しかしながら、問題点として、そのスペクトルの解釈をどうするかという問題が残っていた。そこで、分子科学研究所の石田博士に MD シミュレーションを行っていただいた。石田博士は液体のテラヘルツ領域の fs-RIKES と THz-TDS によるスペクトルを計算できる世界的にも数少ない研究者である。その結果、分極応答と双極子応答のスペクトルでは、イオン種はもとより運動のタイプの違い(並進的および回転的な振動運動)によりスペクトル形状に違いが現れると結論できた。この研究成果は、分子科学討論会での口頭発表およびアメリカ化学会発行の *J. Phys. Chem. B* 誌に論文発表することができた。また、本共同利用研究で長く関わってきた当研究室の学生である安藤雅俊君が本共同利用研究の成果を含めた博士論文を提出し学位(博士(理学))を取得することができた。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出して下さい。)

研究論文

•Physical Properties and Low-Frequency Polarizability Anisotropy and Dipole Responses of Phosphonium Bis(fluorosulfonyl)amide Ionic Liquids with Pentyl, Ethoxyethyl, or 2-(Ethylthio)ethyl Group, Masatoshi Ando, Kaoru Ohta, Tateki Ishida, Ryohei Koido, Hideaki Shirota, *J. Phys. Chem. B* **2023**, *127*, 542-556.

学会発表

•ペンチル基, エトキシエチル基, および2-(エチルチオ)エチル基を有するホスホニウム型イオン液体の低振動数スペクトル: ラマン散乱とテラヘルツ波吸収 (1C02), 安藤雅俊, 太田薫, 石田干城, 富永圭介, 城田秀明, 第16回分子科学討論会(横浜), 2022年9月

10. 共同利用研究に関連した受賞, 博士学位論文の取得, 大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

博士学位論文の取得:安藤雅俊(千葉大学, 令和5年3月, 千葉大学大学院融合理工学府長表彰)

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年 4月 3日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 慶應義塾大学理工学部
職 名 教授
研究代表者名 羽曾部 卓

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号: R04008)

1. 共同利用研究 課題名	一重項分裂を基盤とした逐次反応系における励起ダイナミクス評価			
2. 共同利用研究 目的	一重項分裂発現を目的として申請者の研究グループにおいて合成した機能性分子材料の多励起ダイナミクス評価(電子スピン共鳴など)を行う。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年 6月 1日 ~ 令和5年 3月 31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 羽曾部 卓	慶應義塾大学理工学部	教授	研究実施と総括	
(分担研究者) 酒井 隼人	慶應義塾大学理工学部	専任講師	有機合成および分光・電子スピン共鳴測定	
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	レーザー分子光科学研究部門	氏 名	小堀 康博

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

(課題番号: R04008)

6. 共同利用研究計画

近接二分分子間で一光子の吸収過程から二つの独立した三重項励起子を生成する一重項分裂の発現は二分子連結体を中心に今日まで数多くの報告はある。しかしながら、励起子拡散をはじめとする光エネルギー変換に不可欠な逐次反応への展開は非常に限られている。そこで本研究では一重項分裂を基盤とした逐次反応が可能な π 共役分子連結体や有機無機複合材料を合成する。時間分解に夜過渡吸収分光や電子スピン共鳴測定(TR-EPR)を行い、多励起子状態を含む逐次反応の励起ダイナミクスを評価する。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

R4年度中の実績として、オンラインディスカッション(2回)、試料送付による測定(2回)、メールによる研究打ち合わせ(10回)

8. 共同利用研究の成果

分子内一重項分裂によって生成した2つの三重項励起子の拡散過程を評価するために、新たに一連のテトラセン(Tc)オリゴマーを新たに合成し、その励起ダイナミクスおよび熱力学パラメーターの評価を行った。まず、テトラセンホモオリゴマー[(Tc)_n; n = 2, 4, 6]の比較ではTcの数の増加とともに三重項量子収率(Φ_T)は165%から182%まで増加し、Tcユニットの数に対するエントロピー増大の効果も明らかとなった。次に、末端にエネルギーアクセプターが修飾されたテトラセン6量体[TcF₃-(Tc)₄-TcF₃]を合成し、高効率な励起子捕収率($\Phi_{TT} = 176\%$)を得ることに成功した。末端のTcF₃部位は振動促進の役割も担っており、本研究で検証した一重項分裂によって生成する2つの三重項励起子のエントロピー効果は、Tcユニット数の増加とTcF₃ユニットの振動効果によって、TTの可能性が増加し、励起子の移動が促進したと結論づけることができた。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出して下さい。)

Nakamura, S.; Sakai, H.; Fuki, M.; Ooie, R.; Ishiwari, F.; Saeki, A.; Tkachenko, N. V.; Kobori, Y.; Hasobe, T., Thermodynamic Control of Intramolecular Singlet Fission and Exciton Transport in Linear Tetracene Oligomers. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202217704.

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

特になし

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和4年 5月 16日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 北海道大学大学院・理学研究院
 職 名 教授
 研究代表者名 吉田 紘行

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号: R04012)

1. 共同利用研究 課題名	フラストレート反強磁性体における光の方向二色性の検証			
2. 共同利用研究 目的	フラストレート磁性体における磁気秩序状態に内在するクラスター多極子に基づく光の方向二色性をテラヘルツ領域までの電磁波を使って実験的に検証する。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年6月1日 ~ 令和5年3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 吉田 紘行	北海道大学大学院理学研究院	教授	研究統括	
(分担研究者)				
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ物性物理研究 部門	氏 名	太田仁、大久保晋

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

(課題番号: R04012)

6. 共同利用研究計画

共同利用研究では、 $\text{CaCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2 \cdot 0.6\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{SrCu}(\text{OH})_3\text{Cl}$ の方向二色性の検証を行うことを目的とする。これまでの研究で、磁気秩序を示すフラストレート磁性体として $\text{CaCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2 \cdot 0.6\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{SrCu}(\text{OH})_3\text{Cl}$ の開発に成功している。前者は 7.2 K で磁気秩序が生じ、後者は 2 K まで自発的な磁気秩序は生じないものの 2 K で 2 T ほどの磁場を印加することで磁気トロイダル双極子が誘起されることが分かっている。

共同利用実験では、温度 1.8 K、磁場 55 T までの環境において、テラヘルツ強磁場 ESR 測定装置を用いて 0.05~1.4 THz までの周波数領域の電磁波を $\text{CaCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2 \cdot 0.6\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{SrCu}(\text{OH})_3\text{Cl}$ 単結晶に誘導することで、光の透過率の方向依存性を調べ、方向二色性を実験的に検証する。実験は、申請者が神戸大学へ出張し受け入れ研究者の協力のもとに行うことを計画していた。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

実験の実施に先立ち、2022年6月9日にオンラインにて詳細な物性の紹介、実験条件を検討し、新規に実験装置(部品)を立ち上げる必要があることを共有した。また、2022年8月23日および2022年12月16日に、対面での研究打ち合わせを行い、装置の立ち上げ状況について情報共有を行なった。

8. 共同利用研究の成果

オンライン、対面での研究打ち合わせにより、 $\text{SrCu}(\text{OH})_3\text{Cl}$ における磁場とトロイダル双極子の方向、従って二色性が期待される方向を決定した。これまでの基礎物性測定の結果を検証することで、磁場を a 軸に印加した際には b 軸にトロイダル双極子が、磁場を b 軸に印加した際には a 軸にトロイダル双極子が向くことがわかった。また、磁場を c 軸に印加するとトロイダル双極子は結晶全体で打ち消しあうことが明らかになった。方向二色性はトロイダル双極子と平行方向に生じると考えられるため、実験では磁場を $a(b)$ 軸に印加し、二色性を $b(a)$ 軸方向で測定することを定めた。また、 c 軸に印加し二色性が消失することを確認することで、理論モデルを実証できると期待される。この議論をもとに、 $\text{SrCu}(\text{OH})_3\text{Cl}$ 単結晶試料の結晶方位を X 線回折実験によって確定し、それぞれ a 面、 b 面、 c 面を研磨した試料を作成し、光学測定を行う準備を進めた。実験装置が立ち上がり次第、測定を開始する予定である。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出して下さい。)

なし

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

なし

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年5月29日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 神戸大学・大学院理学研究科
 職 名 准教授
 研究代表者名 松岡英一

下記のとおり令和 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04013)

1. 共同利用研究 課題名	幾何学的フラストレーションを有する希土類化合物の物質探索			
2. 共同利用研究 目的	新しい希土類化合物である RTX (R = 希土類、T = Ag, Pd, In、X = Mg, Pb) の磁化を SQUID 磁束計を用いて測定し、幾何学的フラストレーションが金属性の f 電子系化合物にもたらす効果を系統的に検証することを目的とする。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年6月1日 ~ 令和5年3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 松岡英一	神戸大学大学院理学研究科	准教授	研究統括	
(分担研究者) 菅原仁 大西昂 薦田拓也 林英利 三嶋竜太	神戸大学大学院理学研究科 神戸大学大学院理学研究科 神戸大学大学院理学研究科 神戸大学大学院理学研究科 神戸大学大学院理学研究科	教授 修士二年 修士二年 修士二年 修士一年	実験及び結果解析 実験及び結果解析 実験及び結果解析 実験及び結果解析 実験及び結果解析	
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ物性物理学 研究部門	氏 名	太田仁

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

6. 共同利用研究計画

研究代表者は最近、結晶構造がフラストレーションを有する新しい希土類化合物として、希土類 R が擬カゴメ格子を組む六方晶化合物 RTX (T = Ag, Pd, In, X = Mg, Pb) を見出した。本年度はこれらの化合物のうち、近藤効果による物性発現が期待できる R = Ce, Pr, Sm を含む化合物を中心に、SQUID 磁束計を用いた磁化測定による磁氣的性質の解明を行い、フラストレーションに起因した物性を探る。磁化測定に用いる試料は申請代表者の研究室において作製され、まず電気抵抗率と比熱の測定を 0.4 K 以上の温度で行って相転移の有無を調べる。続いて、SQUID 磁束計による磁化測定を行って、相転移の種類を同定する。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)
研究代表者、もしくは分担研究者が極低温部門に直接出向いて SQUID 磁束計を用いた実験を行った。その実験過程で、極低温部門の櫻井敬博助教と、原茂生特命技術員との対面による打ち合わせも行った。

8. 共同利用研究の成果

いくつかの新しい RTX 系化合物の基礎物性測定から以下の①と②の結果が得られた。また、希土類系の新物質探索を行った結果、以下の③の結果が得られた。

① **RMgIn** CeMgIn がネール温度 $T_{N1} = 2.1$ K, $T_{N2} = 1.7$ K, $T_{N3} = 1.3$ K で逐次反強磁性転移を示すことが分かった。逆磁化率から見積もった常磁性キュリー温度の絶対値 $|\theta_p|$ と T_{N1} の比が $|\theta_p|/T_{N1} = 7.9$ と比較的大きいのは、フラストレーションによって T_{N1} が抑制されたためと考えられる。また、PrMgIn が 0.4 K 以上で磁気秩序を示さないことが分かった。磁化率と比熱の温度依存性から、結晶場下で分裂した Pr の 4f 準位の基底状態が非磁性の一重項であることが分かった。

② **RPdPb** CePdPb が 1.7 K で強磁性的な相転移を示し、1.3 K でも何らかの相転移を示す重い電子系化合物であることが分かった。一方、PrPdPb は 0.4 K 以上で磁気秩序を示さないことが分かった。磁化率と比熱の温度依存性から、結晶場下で分裂した Pr の 4f 準位の基底状態が非磁性の一重項であることが分かった。また、SmPdPb が $T_{N1} = 6.6$ K と $T_{N2} = 5.6$ K で反強磁性転移を示すことが分かった。磁化率が T_{N1} でカスプを示すものの、3.4 K 以下で増加に転じる理由は、フラストレーションによって T_{N2} 以下の温度においても、数十%程度の Sm イオンの磁気モーメントが秩序化せずに揺らいでいるためであると考えられる。

③ **CeIrIn₂** 新しい直方晶化合物 CeIrIn₂ が、 $T_N = 2.8$ K で反強磁性転移を示す高濃度近藤格子系化合物であることが分かった。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出して下さい。)

<論文>

1. Eiichi Matsuoka, Hitoshi Sugawara, Takahiro Sakurai, and Hitoshi Ohta, "Low-Temperature Magnetic and Transport Properties of a New Orthorhombic Compound CePt₃Sn₂", JPS Conf. Proc. **38**, 011086 (2023).

<学会発表>

2. 今福太一、寺下敦規、佐戸礼津、松岡英一、櫻井敬博、太田仁、仲村愛、本間佳哉、青木大、菅原仁「反強磁性近藤格子 CePt₃P のアニール効果」日本物理学会 2022 年秋季大会 (2022 年 9 月 東京工業大学)

3. 大西昂、松岡英一、菅原仁、櫻井敬博、太田仁「六方晶フラストレーション化合物 REMgIn (RE = 希土類) の低温物性」日本物理学会 2022 年秋季大会 (2022 年 9 月 東京工業大学)

4. 林英利、松岡英一、菅原仁、櫻井敬博、太田仁「ZrNiAl 型六方晶化合物 RPdPb (R = 希土類) の低温物性」日本物理学会 2022 年秋季大会 (2022 年 9 月 東京工業大学)

5. 中村優介、松岡英一、菅原仁、櫻井敬博、太田仁「ZrNiAl 型六方晶化合物 RAgMg(R = 希土類)の磁性と伝導」日本物理学会 2022 年秋季大会 (2022 年 9 月 東京工業大学)

6. 大西昂、松岡英一、菅原仁、櫻井敬博、太田仁「六方晶フラストレーション化合物 REMgIn (RE = 希土類) の低温物性 II」日本物理学会 2023 年春季大会 (2023 年 3 月 オンライン開催)

7. 松岡英一、菅原仁、櫻井敬博、太田仁「新しい直方晶化合物 CePd₂Sn₃ の低温物性」日本物理学会 2023 年春季大会 (2023 年 3 月 オンライン開催)

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

公益財団法人 池谷科学技術振興財団 2023 年度研究助成 「ハロゲンを含む三元希土類化合物における新奇物性の探索」 1,200,000 円 研究代表者:松岡英一

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和4年 4月17日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 山形大学・大学院有機材料システム研究科
 職 名 教授
 研究代表者名 松葉 豪

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04015)

1. 共同利用研究 課題名	アイオノマーの緩和挙動のラマンおよび THz 分光測定を用いた評価			
2. 共同利用研究 目的	アイオノマーは結晶構造だけではなく、1～3ナノメートルの大きさをもつイオン会合体が力学特性に大きな影響を及ぼすことから、構造と緩和の相関について THz 分光を用いて明らかにすることを目指す。また、水分子とアイオノマー材料の相互作用について測定するためのセル、測定手法を確立することを目指す。			
3. 共同利用研究 期間	令和 4年 6月 1日 ～ 令和 5年 3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(申請代表者) 松葉 豪	48	男	大学院有機材料システム研究科	
(分担研究者) 村山 駿介	25	男	大学院有機材料システム研究科	
岡田 朋也	24	男	大学院有機材料システム研究科	
佐藤 志帆	23	女	大学院有機材料システム研究科	
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ分子化学研究 部門	氏名	佐藤 春実

※次ページの6～10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6～10の項目全体では1頁に収めて下さい。

(課題番号:R04015)

6. 共同利用研究計画

本課題の目的として、新たに水分子と材料との相関を測定することを目指した。新型コロナウイルスによる影響を考慮しながら、R3年度に引き続き、湿度依存性のセルの製作と実験実施を加えた実験を計画した。また、5月に一度学生とともに佐藤教授のところに訪問させていただき、打ち合わせおよび本年度の申請に向けた予備実験を実施する予定である。計画としては、

R4 6月～7月 佐藤教授研究室訪問、第1回目測定

R4 9月～11月 佐藤教授と解析方法について議論、湿度制御セルの作成

R4 12月～R5 3月 測定(2回目)、温度依存性について測定

ただし、コロナウイルスの感染状況を考慮し、神戸大学および山形大学の行動指針に従う

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください) 計画にもある通り5月に一度実験させていただいた。結果について議論し、湿度制御セルの利用について議論を行い、3月に実験を行った。また、論文について、メールベースで議論を行った。

8. 共同利用研究の成果

○湿度制御装置を利用した分析手法の確立

Linkam 製湿度制御セルをマイクロビームラマン分光装置に取り付けて、測定することに成功した。来年度以降に向けてセル厚みを薄くしてより高倍率で測定できるようにする必要があるなど課題も見つかった。

○結晶性の側鎖を有するコポリマー材料の分析

結晶性の側鎖を有するグラフトコポリマーの温度依存性を測定した。その結果、温度が低く側鎖が結晶している場合は、アコーディオンモードに起因する振動が観測されたのに対し、融点より高い場合、アコーディオンモードが消失していることがわかった。

○多糖類試料の測定

多糖類の試料についても測定を行った。非常に熱に弱いなどの欠点はあったが、強度を調整することで偏光時における測定や湿度依存についても予備的な実験を行い、成果を得られた。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出してください。)

(投稿中)

Tomoya Okada, Mizuho Ishii, Harumi Sato, Go Matsuba, "Morphology of the grafted co-polymer in various crystallizable side-chain components", Polymer, Submitted.

(学会発表予定)

山路彩花、松葉豪、桶葭興資、池本夕佳、湿度制御下におけるキサントガム一軸配向膜と水の相互作用の解明、繊維学会年次大会(2023年6月)

岡田朋也、鈴木和希、油井海翔、松葉豪、側鎖結晶性高分子の結晶・相分離構造の温度依存性、繊維学会年次大会(2023年6月)

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

特になし。

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和4年 3月24日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 福井大学遠赤外領域開発研究センター
 職 名 助教
 研究代表者名 石川 裕也

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04016)

1. 共同利用研究 課題名	二次元磁性体のテラヘルツ分光			
2. 共同利用研究 目的	強磁場領域における ESR 測定による物性解明。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年6月1日 ~ 令和5年3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役割分担	
(申請代表者) 石川 裕也	福井大学遠赤外領域開発研究センター	助教	実験、解析の実施。	
(分担研究者) 藤井 裕 菊池 彦光 林 哉汰 光藤 誠太郎 浅野 貴行 佐野 巴則 高橋 佑輔 仲川 晃平	福井大学遠赤外領域開発研究センター 福井大学遠赤外領域開発研究センター 福井大学大学院工学研究科 福井大学学術研究院工学系部門物理学講座 福井大学学術研究院工学系部門物理学講座 福井大学大学院工学研究科 福井大学大学院工学研究科 福井大学遠赤外領域開発研究センター	准教授 教授 大学院生 教授 准教授 大学院生 大学院生 研究機関研究員	実験及び解析補助。 試料作成及び評価。 実験の補助。 解析補助。 試料作成補助。 実験の補助。 実験の補助。 実験の補助。	
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	分子フォトサイエンス研究 センター	氏 名	太田 仁、大久保 晋

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

6. 共同利用研究計画

試料合成と基本物性の評価及び極低温下の低磁場・低周波領域の ESR 測定を福井大遠赤センターの石川らによって行う。これによりターゲットとなる印加磁場方向、周波数領域を見積もる。テラヘルツ ESR 測定は、神戸大分子フォトのテラヘルツ光源 BWO・FIR レーザーを用いて行う。複数の光源を使用し、極めて広い帯域の ESR 測定を行うことで準連続的なエネルギー - 磁場スペクトルを得ることができる。新奇量子相への転移は吸収強度の周波数依存性、あるいは線幅の角度依存性により顕在化するので、各光源の出力強度の規格化を行う必要がある。そのため光学系の見直しならびに、規格化のための標準試料の同時測定を行い、目的を達成する。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

本年度は神戸大学へ 2 度ほど(計 7 日間)訪問し、低次元磁性体 $\text{Ca}_2\text{Cu}(\text{OH})_4[\text{B}(\text{OH})_4]_2$ (鉱物名: Henmilite 逸見石)と $\text{Cu}(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{NO}_3)_2$ (CuPzN) の高周波 ESR 測定を実施した。

Henmilite については、熱検出法による 130 GHz の角度回転 ESR 及び複数試料による試料依存性に関する測定を実施した。

CuPzN については同様に 130 GHz において熱検出法により測定を実施した。

8. 共同利用研究の成果

<Henmilite>

2 つの試料による測定から印加磁場 $H//b^*$ 方向での常磁性温度、周波数領域における複数ピークの分裂が有ることが判明した。この結果を受けて、福井大遠赤センターでは ^{11}B 及び ^1H 核に対する核磁気共鳴測定を実施し現在解析を進めている。

2 本のローレンチアンによる重ね合わせで説明が可能で有ることがわかった。

<CuPzN>

角度回転 ESR により $H//b$ と c の中間軸に対し平行に磁場印加し 250 - 5 K までの温度領域にて ESR 測定を行ない、上記領域において 2 本のローレンチアンによる重ね合わせで説明が可能で有ることがわかった。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出して下さい。)

<Henmilite>

学会発表

- ・国際会議 (29th International Conference on Low Temperature Physics) : 1 件
- ・国内学会 : 3 件

<CuPzN>

- ・国内学会 : 1 件

10. 共同利用研究に関連した受賞, 博士学位論文の取得, 大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

該当なし。

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和4年 5月 19日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 東邦大学・薬学部
 職 名 准教授
 研究代表者名 岩田 達也

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04017)

1. 共同利用研究 課題名	LOVドメインの光反応における FMN 近傍のグルタミン残基の役割			
2. 共同利用研究 目的	LOVドメインの光反応における FMN の励起三重項状態の寿命が FMN 近傍のグルタミン残基によって制御されている可能性が示唆された。本研究は、グルタミンが FMN の光反応に与える影響を明らかにするため、グルタミンの位置にアミノ酸変異体を網羅的に作製し、過渡吸収測定と時間分解 EPR 測定をおこなう計画とした。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年 6月 1日 ~ 令和5年 3月 31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 岩田 達也	東邦大学薬学部	准教授	研究全般の遂行	
(分担研究者)				
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	分子フォトサイエンス 研究センター	氏名	小堀 康博

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

6. 共同利用研究計画

1. 本研究は、フラビンモノヌクレオチド(FMN)を結合し、青色光センサータンパク質として機能する LOV ドメインを対象として、FMN 近傍のアミノ酸の変異が光反応に与える影響を調べる。シロイヌナズナ フォトリポピン 2 の LOV2 ドメイン (AtpHot2-LOV2) を対象として、FMN と水素結合を形成しているグルタミン 489 に対してアミノ酸変異導入を試み、大腸菌の発現系で FMN を結合した状態で得られる変異体をその後の測定に用いる (これまでにロイシンとアスパラギンについては FMN を結合した LOV を得ることができた)。得られた変異体の定常光照射による中間体の生成、及び中間体生成の量子収率を測定する。これらの実験については東邦大で行う。
2. FMN を結合した変異体のうち、興味深い光反応を示したものに関して神戸大・分子フォトの小堀教授のナノ秒可視・近赤外時間分解分光システムによる測定をおこなう。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション (回数)、試料送付による測定等について記載してください)

オンラインディスカッション: 2023 年 2 月 15 日 1 回

8. 共同利用研究の成果

研究計画 1 に関して

グルタミン 489 をロイシンに置換した変異体 (Q489L) に対して光反応を観測し、野生型の光反応と比較した。室温で Q489L 変異体に青色光照射をおこなうと、野生型と同様にフラビン-システイン付加物形成反応を示すスペクトルを得た。この反応物 (S390 中間体) は自発的にもとの LOV へと戻っていったが、その半減期 ($t_{1/2}=52$ s) は野生型の半減期 (4.6 s) と比較して 10 倍以上長寿命となった。この結果は、過去に測定した別の LOV ドメイン (ホウライシダ ネオクロム 1 LOV2 ドメイン) の Q/L 変異体と同等の性質であった。

次いで、照射する光強度を変えて S390 が蓄積する様子を観測し、そこから S390 生成の光量子収率 (1 光子当たりの中間体生成効率) を求めた。本研究開始時において、S390 の形成に至る FMN の励起三重項状態の寿命が Q489L の方が野生型より長いと推察されたため、Q489L の方が S390 生成効率は高いと想定した。結果は、野生型の量子収率が 0.27 となったのに対し、Q489L は 0.25 となり、両者で中間体形成の効率は変わらなかった。この結果から、以下の仮説を考えた。

- ① WT の FMN の励起三重項状態の寿命はフラビン-システイン付加物の形成のために十分な時間があり、Q489L 変異体において励起三重項状態の寿命がそれより長くてもシステインとの共有結合形成効率の上昇には寄与しない。
- ② LOV (C/A, Q/L) 変異体とは異なり、Q489L 変異体の励起三重項状態の寿命は WT と変わらない。従って S390 の形成効率には影響しなかった。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出してください。)

発表なし

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

該当なし

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年5月11日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 大阪大学大学院工学研究科
 職 名 准教授
 研究代表者名 鈴木充朗

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04018)

1. 共同利用研究 課題名	共有結合性有機構造体のキャリア輸送特性評価			
2. 共同利用研究 目的	申請者らが独自の手法で成膜した共有結合性有機構造体の電荷キャリア輸送特性を時間分解テラヘルツ分光法により評価し、構造体の結晶性と電気物性との相関を明らかにする。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年6月1日 ～ 令和5年3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 鈴木充朗	大阪大学大学院 工学研究科	准教授	研究の総括、サンプル作製、データ解析	
(分担研究者) 矢坂純也	大阪大学大学院 工学研究科	修士1年	サンプル作製	
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ分子化学研 究部門	氏 名	富永 圭介

※次ページの6～10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6～10の項目全体では1頁に収めて下さい。

6. 共同利用研究計画

同じモノマーから成膜条件を変えて作り分けた結晶性薄膜(=共有結合性有機構造体(COF)薄膜)と非晶性薄膜について、時間分解テラヘルツ分光法による電荷キャリア移動度評価を行う。さらに、吸着した水分が電荷キャリア移動度に与える影響についても同測定により評価する。第1回目の測定は6月中に実施し、その結果から必要に応じて2回目以降の測定を検討する。

なお、コロナ禍が継続していることを勘案し、大阪大学で作製したサンプルを送付し神戸大学で測定する形で研究を進める。また、測定結果についてのディスカッションもオンラインベースに実施する予定である。ただし、サンプルの状態をより詳細に確認しつつ測定を行うために、状況が許せば測定に参加することも検討する。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

研究は大阪大学から送付したサンプルを神戸大学で測定する形で実施した。なお、今年度は神戸大学を訪問しての研究は行っていない。

実験については、計画に沿って結晶性膜と非晶性膜の時間分解テラヘルツ測定を行った。また、測定結果と今後の方針に関するオンラインディスカッションを計3回実施した。

8. 共同利用研究の成果

乾燥状態にある結晶性薄膜と非晶性薄膜の電荷キャリア移動度を時間分解テラヘルツ分光測定で評価したところ、両サンプルで同程度の弱いシグナルが観測された。この結果から、今回評価した系では、結晶性の違いがキャリア輸送特性に大きく影響しないと考えられる。これは、過去に研究代表者らが実施した2端子測定によるバルク電流/電圧特性評価の結果と一致する。

また、結晶性薄膜の2端子測定で観測された水分吸着による電流値の増大について、時間分解テラヘルツ分光測定でも同様の挙動が確認できるかを検討した。しかし、水分が吸着した状態の結晶性薄膜は安定性が低く、測定中に一部分解する様子が見られた。そのため、これまでの検討では吸着した水分が電荷キャリア移動度に与える影響を確認するには至っていない。今後は、より安定なCOFの薄膜を用いるなどして、引き続き検討を進めたい。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出してください。)

該当なし。

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

該当なし。

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年 5月 15日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 日本大学文理学部物理学科
 職 名 准教授
 研究代表者名 山本大輔

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04019)

1. 共同利用研究 課題名	圧力下テラヘルツ ESR と新規理論手法による三角格子反強磁性体 CsCuCl ₃ の研究			
2. 共同利用研究 目的	これまで難しかった量子フラストレート反強磁性体の量子揺らぎや圧力印可によって誘起される磁気相の解析を、圧力下テラヘルツ ESR と新規開発の理論手法を組み合わせることで達成する。三角格子反強磁性体 CsCuCl ₃ をターゲットとして方法を確立したのち、一般の量子フラストレート反強磁性体への拡張を目指す。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年 6月 1日 ~ 令和 5年 3月 31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 山本大輔	日本大学文理学部物理学科	准教授	理論解析・研究総括	
(分担研究者)				
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ物性物理学 研究	氏 名	太田仁・大久保晋

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

(課題番号: R04019)

6. 共同利用研究計画

三角格子反強磁性体 CsCuCl₃ の圧力下で発現する多様な磁気秩序の解明に向けて、神戸大学分子フォトサイエンス研究センター所有の圧力下テラヘルツ ESR 装置などを用いて圧力下でのスピン状態を詳細に明らかにする。本年度は圧力下テラヘルツ ESR による反強磁性ギャップおよび Néel 温度の圧力依存性を詳細な実験・理論解析の両面から解析する。本年度中にそれら 2 件に関する成果を論文にまとめることを目指す。約四半期ごとに対面での打ち合わせを行い、実験結果と理論解析双方の成果を綿密にすり合わせ、実験、理論両面からの完全理解を行う。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

- ・「第 17 回・第 18 回量子スピン系研究会」会期中に研究打ち合わせ(計 2 回)
- ・神戸大にて実験結果の共有と理論解析の議論(1 回)
- ・東工大にて実験結果の共有と理論解析の議論(1 回)

8. 共同利用研究の成果

まず、これまでに得られている CsCuCl₃ の Néel 温度の圧力依存性の実験データに対して、理論模型を用いた解析を行った。理論模型のパラメータは以前の共同利用・共同研究課題で得られた論文[Nat. Commun. **12**, 4263 (2021)]のものを用いた。大規模クラスター平均場近似と熱的純粋状態法を組み合わせた新たな数値計算手法(CMF+TPQ)を用いることで、本物質に重要な量子揺らぎ効果に加えて低次元性に由来する大きな熱揺らぎも取り込んで議論した。その結果、圧力によって面間相互作用が減少し、常圧での擬一次元な振る舞いから3次元的な変化することに伴い、熱揺らぎが顕著に抑制されることが分かった。これは圧力によって増加する量子揺らぎの効果と真逆であり、興味深い結果である。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出して下さい。)

研究発表

- ・ 山本大輔、櫻井敬博、大久保晋、太田仁、田中秀数、上床美也
Pressure effects on the magnetic transition temperature of CsCuCl₃: CMF+TPQ analysis
第17回量子スピン系研究会
沖縄県那覇市ともかぜ振興会館、沖縄、2022年4月22日

10. 共同利用研究に関連した受賞, 博士学位論文の取得, 大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年5月2日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 東京大学 大学院総合文化研究科
 職 名 准教授
 研究代表者名 内田さやか

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04020)

1. 共同利用研究 課題名	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			
2. 共同利用研究 目的	時間分解単一分子顕微分光装置を用い、レドックス活性を有するイオン結晶(還元型)からの電子移動とイオン交換を通じて、細孔内に生成する発光性の小核金属クラスターの核数と価数を決定し、その生成機構を解析する。イオン結晶の組成-細孔構造-クラスターの特長(発光特性)の相関を明確にすることを本研究の目的としている。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年6月1日 ~ 令和5年3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 内田 さやか		准教授	研究全般	
(分担研究者) 原口 直哉 黒崎 大誠		大学院生 大学院生	クラスター合成・各種データ取得及び解析 クラスター合成・各種データ取得及び解析	
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	神戸大学・分子フォトサイエンス研究センター	氏 名	立川 貴士

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

(課題番号: R04020)

6. 共同利用研究計画

レドックス活性を有する種々のイオン結晶(還元型)を鋳型として、銀クラスターおよび銅と銀からなる合金クラスターを合成する。受入研究者が所有する時間分解単一分子顕微分光装置を用い、クラスターを含んだ結晶の発光スペクトルを測定する。得られる発光スペクトルの極大波長から、生成する発光性のクラスターの組成を決定する。既報の銀や合金クラスターのスペクトルデータ、申請者と受け入れ研究者の発光性小核銀クラスターに関する共著論文(Nanoscale 2019, EurJIC 2021)を参考に、得られたスペクトルデータを解釈する。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

昨年度はまだコロナの影響もあったため、貴学への出張は行わず、試料送付(合計 50 サンプル程度)による測定依頼と、メールベース(平均して月 1 回以上)によるディスカッションを行った。

8. 共同利用研究の成果

- ・等構造だが組成の異なるイオン結晶を鋳型として、発光性銀クラスターを合成し、その発光スペクトルを測定していただいた。その結果、鋳型から銀イオンへの電子移動量が増加するにつれて、クラスターが成長することが明らかになった。
- ・予備的に合成した合金クラスター(Cu/Ag など)についても発光スペクトルを測定していただいた。発光性ではあったが、別途、クラスターの幾何構造の検討が必要である。
- ・上記とはことなるイオン結晶に予め銀イオンを導入し、メタノール溶液中で光還元した試料についても、発光スペクトルを測定していただいた。その結果、非常に強い発光、かつ、これまでよりシャープなピークが観測された。R5 年度は、試料調製の最適化、発光スペクトル測定、発光機構解明を行う予定である。

※銀クラスターの発光スペクトル測定結果をとりまとめた論文が、国際的評価の高い学術誌 (Small, IF = 15.153) に掲載された(下記参照)。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出してください。)

論文発表: Size-Controlled Synthesis of Luminescent Few-Atom Silver Clusters via Electron Transfer in Isostructural Redox-Active Porous Ionic Crystals

N. Haraguchi, N. Ogiwara, Y. Kumabe, S. Kikkawa, S. Yamazoe, T. Tachikawa*, S. Uchida*, Small, 2300743 (2023). DOI:10.1002/sml.202300743

論文 pdf 添付

Small 誌の表紙への掲載が決定している。

学会発表: 日本化学会第 103 春季年会(2023/3)にて2件(原口、黒崎)、錯体化学会第 72 回討論会(2022/9)にて2件(原口、黒崎)の発表を行った。

10. 共同利用研究に関連した受賞, 博士学位論文の取得, 大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

とくになし。

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年4月30日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 千葉大学大学院工学研究院
 職 名 教授
 研究代表者名 小林範久

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04021)

1. 共同利用研究 課題名	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			
2. 共同利用研究 目的	貴センター保有の時間分解単一分子顕微分光装置を活用し、超高速電気化学発光を示す機能性 DNA 複合体における微細構造中の分子集合状態や光物性の詳細な観測を目的とする。貴センター・立川貴士 教授との共同利用研究である。			
3. 共同利用研究 期間	令和 4年 6月 1日 ~ 令和 5年 3月 31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 小林範久	千葉大学大学院工学研究院	教授	研究統括, 電気化学物性議論	
(分担研究者) 中村一希	千葉大学大学院工学研究院	准教授	光物性・構造測定・議論	
小澤竜輝	千葉大学大学院融合理工学 府先進理科学専攻	博士2年	電気化学素子作成, 光・電気化学 測定	
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	レーザー分子光科学研究部門	氏 名	立川貴士

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

6. 共同利用研究計画

DNA/Ru(II)錯体複合体を用いた超高速電気化学発光やアップコンバージョン電気化学発光の特異的機能発現機構解明のため、立川貴士教授との共同研究として、下記の計画にて実験を実施した。

①貴センターにおいて、DNA/Ru(II)錯体ハイブリッド膜の発光特性の顕微測定および、電気化学反応下における顕微分光計測

②得られたデータをもとにして、同ハイブリッド膜の分子集合状態や超高速電気化学応答に関する議論

7. 共同利用研究の実施状況

・貴センターを訪問しての研究実施:1回 (2022年9月20~21日)

内容:DNA/Ru(II)ハイブリッド膜の顕微発光測定, 電気化学反応下での微視的な光物性計測(計画①)

・対面およびメール議論:4回(実験の事前打合, 実験結果を受けた議論, 論文投稿議論など(計画②))

8. 共同利用研究の成果

DNA/Ru(II)錯体ハイブリッド膜の顕微発光測定(計画①)では、同ハイブリッド膜中に存在する特徴的な凝集構造(直径数 μm 程度)の詳細な発光特性を観測した。顕微分光計測に関しては貴センター、立川教授が実施し、ハイブリッド膜の作製、電気化学反応条件の設定や電解質溶液の調整は中村、小澤が担当した。その結果、電解質溶液にアントラセン誘導體(DPA)を含む系において、DNA/Ru(II)ハイブリッド膜中のRu(II)錯体を選択的に光励起することで、DNA/Ru(II)錯体凝集構造上において、DPAからのアップコンバージョン発光像、およびそのスペクトルを観測した。

さらに、このDPAからのアップコンバージョン発光の過渡蛍光減衰を測定したが、DPAの通常蛍光に特有の数ナノ秒の早い蛍光減衰は観測されず、数100ナノ秒の長い減衰寿命を示した。この長い寿命はエネルギードナーであるRu(II)錯体の励起寿命と対応していることから、DPAからの発光がRu(II)錯体からの励起エネルギー移動を経たアップコンバージョン発光であることが支持される結果となった。これら、立川教授との共同研究で得られた成果は学術論文および各種学会で発表を行い、複数の発表賞を受賞するなどの評価を得た。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

学術論文

[1] Ryuki Ozawa, Kazuki Nakamura, Takashi Tachikawa, Norihisa Kobayashi,

“Device Lifetime Improvement and Efficiency of Upconverted Blue Electrochemiluminescence From 9,10-Diphenylanthracene With DNA/Ru(bpy)₃²⁺ Hybrid Film”,

Journal of the Imaging Society of Japan, Vol. 61, No. 6, pp. 562-569, 2022.

学会発表

[1] ◯小澤 竜輝、中村 一希、立川 貴士、小林 範久

「Ru(bpy)₃²⁺を担持したDNA組織化膜を用いたアセン化合物の電気化学アップコンバージョン発光」

第71回高分子学会年次大会、1P1E009、オンライン、2022年5月、ポスター

[2] ◯小澤 竜輝、中村 一希、立川 貴士、小林 範久

「光電機能DNA/Ru(bpy)₃²⁺複合膜上の9,10-ジフェニルアントラセンのアップコンバージョン発光挙動解析」

第33回配位化合物の光化学討論会、O-14B、オンライン、2022年8月、口頭

[3] ◯小澤 竜輝、中村 一希、立川 貴士、小林 範久

「Spectroscopic Analysis for Mechanism of Electrochemically Triggered Upconverted Luminescence in DNA/Ru(bpy)₃²⁺ Hybrid Film and Their Device Application」

第71回高分子討論会、2ESC03、北海道大学(北海道)、2022年9月、口頭

[4] ◯小澤 竜輝、中村 一希、立川 貴士、小林 範久

「光電機能DNA/Ru(bpy)₃²⁺複合膜の発光寿命解析によるアセン化合物アップコンバージョン発光挙動解明」

第1回ソフトクリスタル研究会、P-11、鎌倉商工会議所(神奈川)、2022年11月、ポスター

[5] ◯小澤 竜輝、中村 一希、立川 貴士、小林 範久

「DNA/Ru(bpy)₃²⁺複合膜における電気化学アップコンバージョンを用いた青色発光寿命向上」

電気化学会第90回大会、2C04、東北工業大学(宮城)、2023年3月、口頭

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

・第71回高分子学会年次大会、学生優秀ポスター賞

・第1回ソフトクリスタル研究会、優秀ポスター賞

・電気化学会第90回大会、最優秀学生講演賞

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年 5月 19日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 佐賀大学・農学部
 職 名 准教授
 研究代表者名 堀谷 正樹

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号: R04024)

1. 共同利用研究 課題名	高圧 ESR 法によるタンパク質機能-物性関連の研究			
2. 共同利用研究 目的	スピンラベル化タンパク質について高圧 ESR 法によるタンパク質物性研究を実施し、タンパク質の耐高圧と熱安定性の相関を明らかにする。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年 6月 1日 ~ 令和5年 3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 堀谷 正樹	佐賀大学・農学部	准教授	研究統括、測定・解析	
(分担研究者)				
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ物性物理学研 究部門	氏 名	大道 英二

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

(課題番号: R04024)

6. 共同利用研究計画

これまで申請者の研究室で南極海より取得したバクテリア由来タンパク質の遺伝子組み換え体発現系、精製系を保持している。これに加え、今年度は深海由来バクテリア由来タンパク質の遺伝子組み換え体発現系、精製系を確立させる。また、前述の南極海由来タンパク質のスピンラベル化試料はすでに保持しているので、本年度はこの試料について、タンパク質の構造ゆらぎが圧力によってどのように変化していくのかを高圧スピンラベル-ESR 法によって実測する。その際、可能であれば温度変化(5~60℃)での測定も行い、温度と圧力の両方の観点からタンパク質の構造ゆらぎの依存性を明らかにする。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

オンラインディスカッション(2回)を Zoom によって行い、測定に関する条件について議論を重ねた。また対面(熊本)でもディスカッションを行い、測定条件を確定させた。

8. 共同利用研究の成果

高圧 ESR 測定に向けて、タンパク質試料を準備したが、ESR 測定に適した条件での試料を得られることが出来なかったため、タンパク質精製方法を再検討したところ、最終的に ESR 測定に最適な試料を得られる条件を確定させることに成功した。

今年度、新規測定対象である深海微生物由来タンパク質の遺伝子組み換え大腸菌による高発現方法確立し、さらに高純度での精製方法にも成功した。佐賀大学で行った通常の ESR 測定から、高圧 ESR 測定に適したタンパク質試料が得られていることを確認した。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出してください。)

特になし

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

科学研究費補助金、基盤研究(B)「EPR・X 線による深海および南極海微生物由来酵素の高活性・高安定性機構の解明」(23H02143)

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年 5月 17日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 徳島大学・大学院社会産業理工学研究部
 職 名 教授
 研究代表者名 岡村英一

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04028)

1. 共同利用研究 課題名	極限環境テラヘルツ分光による黒リン単結晶のトポロジカル状態探索		
2. 共同利用研究 目的	近年、黒リン単結晶の強磁場・高圧下の電子状態がトポロジカル状態である可能性が指摘され、活発に研究されている。本研究では太田研究室の強磁場かつ高圧下のテラヘルツ分光装置を利用することで、黒リンのトポロジカル電子状態を探索する。		
3. 共同利用研究 期間	令和4年6月1日 ~ 令和5年3月31日		
4. 共同利用研究組織			
氏 名	所属部局等	職名等	役割分担
(研究代表者) 岡村英一	徳島大学大学院社会産業 理工学研究部	教授	研究の立案、実験遂行、 データ解析と考察、まとめ
(分担研究者) 三木克哲 谷川琉雨太	徳島大学大学院創成科学 研究科 同上	学生(M2) 学生(M1)	試料準備、実験遂行 試料準備、実験遂行
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ物性物理研究 部門・太田研究室	氏 名 太田仁

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

6. 共同利用研究計画

本研究では、太田研究室で開発されてきた高圧強磁場下の ESR 測定装置を用いて、黒リン単結晶試料の高圧力下のサイクロロン共鳴(CR)の検出をめざした。具体的には以下をめざした。

- (1) ESR 用の高圧セルに黒リンの単結晶を封入して、テラヘルツ透過スペクトルが測定できることを確認する。
- (2) 圧力印加、磁場印加による黒リン試料の光透過強度の変化が見えるか、実際に実験を行う。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

試料はセンターに送付し、太田研究室の櫻井敬博氏と測定に関するディスカッションを対面およびメールのやりとりで行った。測定試料は、岡村が当初送付した高圧合成による単結晶試料と、新たにラサ工業から提供していただいた単結晶試料を用いた。なお、研究代表者の岡村は来学による実験は行えず、櫻井氏に実験を行っていただいた。

8. 共同利用研究の成果

当初、まず常圧で CR 実験を行い、1980 年代に成田らによって行われた CR の実験結果[Narita et al., J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) 3544.]の再現を試みたが、信号を検出することができなかった。これは、常圧ではまだ黒リンのバンドギャップが大きく、十分な密度のキャリアが存在していないためと考えられた。そこで、黒リンのバンドギャップが閉じる圧力である 1.5 GPa 付近まで加圧してキャリア密度が増加した状態で実験を行った。その結果、圧力 1.5 GPa、周波数 418-675 GHz の条件で、1.5~2 T の磁場領域で CR 吸収の観測に成功した。CR 周波数の磁場依存から示唆される有効質量は $0.0825 m_0$ 程度であり、成田らによって報告された常圧での値 $0.22 m_0$ よりも小さい。今後は、より多くの実験を行い、CR 周波数の磁場依存性をより詳しく調べる予定である。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出してください。)

なし。

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

なし。

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年5月18日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 大阪大学・大学院工学研究科
 職 名 教授
 研究代表者名 藤原 康文

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04029)

1. 共同利用研究 課題名	光照射電子スピン共鳴 (ESR) 装置を用いた Tb 添加 AlGa _N における Tb イオン励起機構の 解明			
2. 共同利用研究 目的	AlGa _N に添加された Tb イオンの励起機構を解明することにより、それを用いた次世代緑色 発光ダイオード(LED)の高輝度化を図ることを目的とする。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年6月1日 ~ 令和5年3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 藤原 康文	大阪大学大学院工学研究科	教授	研究の総括と現地での光照射 ESR 測定	
(分担研究者) 竹尾 敦志	同上	D1	試料作製と発光特性評価	
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ物性物理学研 究部門	氏名	太田(仁)・大久保

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

6. 共同利用研究計画

- (1) Tb 信号の対称性: 極低温において Tb 添加 $Al_xGa_{1-x}N$ の ESR 測定を行い、Tb 信号の観測、および印加磁場に対する角度依存性を通じて、対称性を明らかにする。
- (2) Al 組成依存性: Al 組成が異なる試料において、Tb 信号およびその対称性の Al 組成依存性を明らかにする。GaN では Tb イオンに起因する発光が観測されないことから、その要因を解明する。
- (3) 光照射効果: 紫外光照射の有無による Tb 信号の変化を調べる。
- (4) 照射光の波長依存性: 光照射効果の波長依存性を明らかにし、Tb 発光の励起波長依存性と併せて、Tb イオンの励起機構を解明する。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

オンライン、打ち合わせ等で実験条件について綿密な打合せを行った。

8. 共同利用研究の成果

Tb 添加 $Al_xGa_{1-x}N$ において Al 組成の見積もりが課題であった。Al 組成を見積もる際、X 線回折(XRD)法より求める方法とフォトルミネッセンス(PL)法より求める方法の 2 種類がある。無添加 $Al_xGa_{1-x}N$ においては、両者の結果は完全に一致するが、Tb 添加の場合、結果が大きく食い違い、PL 法より求められた Al 組成が XRD 法より求められたものより低くなった。そこで、エネルギー分散型 X 線分光(EDX)法により Al 組成を見積もったところ、XRD 法のものとは一致することが明らかになった。現在のところ、サファイア基板上で GaN バッファを用いて、クラックフリーで最大 Al 組成 63%の Tb 添加 $Al_xGa_{1-x}N$ を得ることに成功している。また、Al 組成の系統的に異なる試料も成長できており、次年度の ESR 測定に供する試料群の準備が完了した。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくと記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出して下さい。)

なし

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

なし

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年5月16日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 神戸大学・大学院理学研究科
 職 名 教授
 研究代表者名 内野 隆司

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号: R04030)

1. 共同利用研究 課題名	フラクタル構造を有する超伝導ナノコンポジットの SQUID およびテラヘルツ ESR による磁気構造の解析			
2. 共同利用研究 目的	本研究では, 格子整合したヘテロ界面を有し, かつ, マクロスケールにわたって階層的配列した超伝導体/半導体ナノコンポジットの巨視的磁気構造を超伝導量子干渉計 (SQUID) にて観測する。将来的には, この界面領域の微視的磁気構造を, SQUID-THz ESR によっても測定する。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年 6月1日 ~ 令和5年3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役割分担	
(研究代表者)	神戸大学大学院理学研究科	教授	実験計画立案, 測定, 結果のまとめ	
(分担研究者)				
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ物性物理学研 究部門	氏 名	太田 仁

※次ページの6~10の項目は, 枠幅を自由に変更できます。但し, 6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

6. 共同利用研究計画

昨年度に引き続き、神戸大学分子フォトサイエンス研究センター所有の SQUID (Quantum Design, MPMS-XL) にて磁化測定を行う。数ミリ角に調製した試料につき、ゼロ磁場冷却 (ZFC) および磁場冷却 (FC) 下での磁化を 2 から 300 K の温度域で行う。本年度では、Mg/MgO/MgB₂ フラクタルナノ複合体に代表的な半導体である Si 元素を Si, SiO, SiO₂ 粉末として新たに添加することにより、超伝導体-半導体フラクタルナノ複合体の合成を試みた。特に本論文では、合成条件や Si 源粉末が試料の構造、超伝導特性に及ぼす影響について調べ、考察した。超伝導体-半導体ナノ複合体の超伝導特性に関する報告例は少ない。本研究では、超伝導体-半導体フラクタルナノ複合体の合成条件の最適化と超伝導近接効果の発現機構の解明を通して超伝導特性のさらなる向上と、新しい電気、磁気特性の発現を目指して一連の研究を行った。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション (回数)、試料送付による測定等について記載してください)

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター所有の SQUID (Quantum Design, MPMS-XL) にて、毎月1週間程度の頻度で磁化測定を行なった。

8. 共同利用研究の成果

Mg/MgO/MgB₂ ナノ複合体の出発原料に Si 源として Si, SiO, SiO₂ を添加して超伝導体-半導体ナノ複合体を作製した。いずれの Si 源を用いても半導体である Mg₂Si が導入されることがわかった。Mg/MgO/MgB₂/Mg₂Si ナノ複合体粉末試料の超伝導近接効果及び磁束ピンニング力は、SiO を添加して作製した試料で飛躍的に向上することがわかった。SPS 焼結により緻密化させたバルク体においても、SiO 添加による超伝導特性、特に磁束ピンニング力の増加が観測された。この磁束ピンニング力の増大の起源を調べるために SiO 添加、非添加 SPS 試料に対して磁束ピンニング力解析を行った。その結果、SiO 添加、非添加試料で磁束ピンニング機構はいずれも二次元的な表面ピンニング機構によって支配されていることが明らかとなった。すなわち、Mg₂Si はそれ自体が磁束ピンニング中心として作用しているのではなく、常伝導相の超伝導近接効果を強化するような働きをしていると考えられる。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくと記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出して下さい。)

学会発表

応用物理学会 秋季学術講演会 2件 春季学術講演会 2件

日本セミックス協会 秋季シンポジウム 1件 年会 2件

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

日本セラミックス協会秋季シンポジウムにおける講演により中明育 (博士前期1年) が 2022 年 9 月 16 日に講演奨励賞を受賞した。

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年 5月 17日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 山形大学・学術研究院
 職 名 准教授
 研究代表者名 小池 邦博

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04031)

1. 共同利用研究 課題名	テラヘルツ ESR による SmFe ₁₂ 系ハード磁性膜の交換結合状態の研究			
2. 共同利用研究 目的	テラヘルツ ESR を用いたエピタキシャル SmFe ₁₂ 系ハード磁性膜に存在する Fe 基初期成長層との交換結合状態を評価することにより、これまで明確ではなかった本系における初期成長層の有無が SmFe ₁₂ 系ハード磁性膜の減磁過程に与える影響を検討する。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年6月1日 ~ 令和5年3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 小池 邦博	山形大学学術研究院	准教授	研究総括	
(分担研究者) 仲嶋 飛向 宇田 龍生	山形大学大学院理工学研究科 山形大学大学院理工学研究科	修士2年 修士1年	実験 解析	
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ物性物理部門	氏 名	太田 仁、大久保 晋

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

6. 共同利用研究計画

本申請課題を実施するため、山形大学では、エピタキシャル SmFe₁₂系ハード磁性層の微細組織制御(①Fe 基初期成長層の体積分率の増減, ②コラムナ状粒子間の人工粒界層形成)を目指した超高真空環境での薄膜形成を実施する。

神戸大学分子フォトサイエンス研究センターの装置の試料ホルダー等による低温から室温までの磁場-周波数領域におけるテラヘルツ ESR ならびに SQUID 測定実験・解析結果からエピタキシャル SmFe₁₂系ハード磁性層と Fe 基初期成長層との交換結合状態と減磁過程の関係について考察する。なお、新型コロナウイルスの影響で往来ができない場合は、議論をオンラインで行うことや試料送付による実験遂行を計画している。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

本年度はコロナ禍においても研究機関間での有機的な共同研究を維持するため、予めメール等で数回の打合せを行い、山形大学にて作製した数種類の薄膜試料について神戸大学分子フォトセンターへ送付して測定を委託することで得られた結果についてオンライン電話等で議論した。

8. 共同利用研究の成果

①山形大学において基板加熱温度 $T_s = 370\text{ }^\circ\text{C}$ で形成された 500 kA/m の保磁力を有する SmFe₁₂系ハード磁性層の Fe 初期層を断面 TEM 観察によって詳細に調査することを目指し、共同研究先である九州大学板倉研究室へ委託した結果、高分解能 STEM-HAADF 観察の結果、Mo 下地層上に α -Fe 相が界面転位を生成しながらエピタキシャル成長して山脈状組織を形成し、この α -Fe 相の(110)結晶格子を引き継いで SmFe₁₂相の c 軸が基板に対して垂直に配向して生成し、基板温度により α -Fe の生成量が変化することで、SmFe₁₂ 結晶の配向状態に影響することが明らかとなった。すなわち、Mo 下地層上に α -Fe の山脈状組織が形成された後、およそ 50 nm サイズの SmFe₁₂ 柱状晶が MgO(001)[100] // Mo(001)[110] // α -Fe (001)[110] // SmFe₁₂(001)[100]の方位関係をもってエピタキシャル的に生成される一方で、上記サンプルよりも保磁力の低い $T_s = 410\text{ }^\circ\text{C}$ で形成されたサンプルは、山脈状組織を持つ α -Fe 初期層の生成量が少なく、生成された SmFe₁₂ 柱状晶の c 軸配向度が向上する。

②柱状晶の SmFe₁₂ ナノ磁石粒子形成とその側面修飾を念頭に置いた SmFe₁₂ ナノ磁石粒子の物理的・磁氣的孤立を目指し、Ar イオンエッチングと赤外レーザーを組み合わせた非熱平衡粒界拡散プロセス(NTE-GBDP)法を導入することで非磁性 Nd 元素を粒界拡散させた SmFe₁₂ 薄膜の形成を試みた。この結果、NTE-GBDP 法を適用した試料は c 軸垂直配向状態を保ったまま、処理前に比べ約 1.5 倍、保磁力が増大することが明らかになった。

さらに、ハード相として ThMn₁₂ 構造を有する Sm(FeCo)₁₂ ナノ磁石粒子へソフト相として α -Fe 相を接合したナノコンポジット構造をもつナノ磁石粒子の磁化反転過程と反磁場分布について、マイクロマグネティクスシミュレーター(OOMMF)を用いた理論的考察を行うことで、Sm(FeCo)₁₂ 単相よりも高い最大エネルギー積(BH)_{max}を持つナノコンポジット Sm(FeCo)₁₂/ α -Fe 磁石粒子を提案した。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出してください。)

1. R. Uda, K. Koike, N. Inaba, H. Kato, M. Itakura, S. Okubo, H. Ohta, and, H. Tsuchiura, "Maximum Energy Product of Exchange-Coupled Sm(FeCo)₁₂/ α -Fe Nanocomposite Particle", KPC-01, The 67th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials (MMM 2022), Oct. 31- Nov. 11, 2022, (hybrid)
2. 宇田龍生, 小池邦博, 稲葉信幸, 加藤宏朗, 板倉 賢, 大久保晋, 太田 仁, Sm(Fe_{0.8}Co_{0.2})₁₂/ α -Fe ナノコンポジット粒子における(BH)_{max} の接合面方位依存性, 2022 年応用物理学会東北支部 第 77 回学術講演会, 2022 年 12 月 1 日(木) ~ 12 月 2 日(金) (ハイブリッド).
3. R. Uda, K. Koike, N. Inaba, H. Kato, M. Itakura, S. Okubo, H. Ohta, H. Tsuchiura, AIP Advances, **13**, (2023), 025311(1)-025311(7) . DOI:10.1063/9.0000506.

10. 共同利用研究に関連した受賞, 博士学位論文の取得, 大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

1. JSPS 科学研究費補助金 基盤(B) No.16H04488 (代表 : 小池邦博)
2. JSPS 科学研究費基金 基盤(C) No. 20K05059 (代表 : 小池邦博)

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年 4月28日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 岡山理科大学・教育推進機構
 職 名 准教授
 研究代表者名 稲垣 祐次

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R04032)

1. 共同利用研究 課題名	テラヘルツ ESR 分光による $\text{KBa}_3\text{Ca}_4\text{Cu}_3\text{V}_7\text{O}_{28}$ のスピン液体状態における低エネルギー励起の観測			
2. 共同利用研究 目的	表題の物質におけるスピン液体状態を特徴づける磁気的エネルギー構造をテラヘルツ ESR 分光測定により確定することを目的とする。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年 6月 1日 ~ 令和5年 3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(研究代表者) 稲垣祐次	岡山理科大学	准教授	実験・解析・成果公表	
(分担研究者)				
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ物性物理学 研究部門	氏 名	太田仁 教授 大久保晋 准教授

※次ページの6~10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6~10の項目全体では1頁に収めて下さい。

(課題番号:R04032)

6. 共同利用研究計画

表題の物質は正三角形を基本ユニットとする 3 次元反強磁性体である。極低温50mK においても磁氣的秩序状態を示さずスピン液体状態を保っていることが分かっており、系の基底状態やエネルギー構造に興味を持たれている。そこで単結晶試料に対して ESR 分光を実施することで特に系の低エネルギー励起に関する知見を得ることを目的として本研究を実施する。

最低温度における ESR 分光を広範な外部磁場の下で実施して系のエネルギー構造を確定する。その後、基底状態に関する情報を得る為、更には低エネルギー構造の由来を特定する為、詳細な温度依存性の測定を特徴的ないくつかの周波数の下で実施する。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

オンラインに加え、現地に赴いて今後の研究方針について具体的に打ち合わせを実施した。

8. 共同利用研究の成果

平行して進めている他の測定手段を用いた研究では特に比熱の結果から大きなエネルギーギャップの存在が示唆されているが、一方でギャップをもたらす構造の歪を直接的、間接的に示す他の実験的証拠は得られていない。それらを踏まえ、現地での打ち合わせでは、逆に圧力印加により構造を歪ませた状態で測定を実施することで、ギャップの存在を明確に計測できれば、圧力依存性の外挿から逆にギャップの存在を否定できるのではないかとこのアイデアが出され、今後の研究展開に非常に有益であった。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出して下さい。)

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

様式3

令和4年度神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用研究報告書

令和5年 5月 19日

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター長 殿

所属機関・部局名 岡山大学 学術研究院自然科学学域
 職 名 准教授
 研究代表者名 神戸高志

下記のとおり令和4年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号: R04033)

1. 共同利用研究 課題名	アルカリ超酸化物磁性体の圧力下 ESR による研究			
2. 共同利用研究 目的	アルカリ超酸化物磁性体の圧力下での酸素分子の電子状態の評価及び磁氣的基底状態への圧力効果を明らかにする。			
3. 共同利用研究 期間	令和4年6月1日 ~ 令和5年3月31日			
4. 共同利用研究組織				
氏 名	所属部局等	職名等	役 割 分 担	
(申請代表者) 神戸 高志	56	男	岡山大学	
(分担研究者) 中野岳仁	49	男	茨城大学	
木村彰杜	23	男	岡山大学	
5. センター内受入研究者	研究部門・ 分野名	テラヘルツ物性物理学	氏 名	太田 仁

※次ページの6～10の項目は、枠幅を自由に変更できます。但し、6～10の項目全体では1頁に収めて下さい。

(課題番号:R04033)

6. 共同利用研究計画

本年度は、圧力下磁化測定がなされている CsO₂ における圧力下で ESR 測定を行う。常温での X 線回折実験では、1GPa、2GPa 及び 3.3GPa 付近に構造変化が観測されている。また、前述したように、バルクの磁化測定では 0.3GPa と 0.8GPa の圧力で磁性の変化が観測されている。一方、3次元磁気相転移温度 (~10K) はほとんど圧力変化がない。常温で常圧から最大圧力 (2.5GPa) の範囲で ESR 実験を行い、構造相転移温度における酸素分子の分子配向に関する情報を得る。また、(可能であれば) 低温では磁気相転移温度の前後の常磁性領域と反強磁性領域において、圧力下の ESR 実験を行いたい。特に、0.8GPa 付近の非磁性的な変化の起源について、酸素分子の電子状態の変化の有無を明らかにする。また、この系の磁気秩序相の磁気構造は確定していない。現在、中性子散乱実験を進めており、相補的な実験として、常圧でのテラヘルツ強磁場 ESR によって、反強磁性秩序相の反強磁性共鳴の観測を試みる。

7. 共同利用研究の実施状況

(来学による研究実施、オンラインディスカッション(回数)、試料送付による測定等について記載してください)

オンラインおよび対面での打ち合わせ(2回)を行い、実験条件に関する議論を行った。

8. 共同利用研究の成果

令和4年度に CsO₂ における中性子回折実験を行い、反強磁性秩序状態での磁気構造を決定出来た。この結果は、本課題で実施予定の常圧下での反強磁性共鳴の観測に関連する成果である。また、本試料は嫌気性が強くハンドリングが難しいため、常圧および圧力下での ESR 実験については実験条件を詳細に検討する必要がある。令和4年度は受け入れ教員と実際の装置を見て打ち合わせを行った。試料セルへの充填は申請者のグローブボックス中で行い、気密な容器に入れて持参することとした。

9. 共同利用研究成果の学会発表・研究論文発表状況

(本センターの担当教員の氏名の記載、又はこの共同利用研究に基づくとの記載のある論文等を記載して下さい。なお、論文の場合は、別刷りを1部提出してください。)

なし

10. 共同利用研究に関連した受賞、博士学位論文の取得、大型研究プロジェクトや競争的資金の獲得等がありましたらご記入ください。

なし