様式3

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 3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　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 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02001)

1. 共同利用研究課題名	希土類および鉄族イオンを添加した発光材料のテラヘルツ ESR による電子状態解析			
2. 共同利用研究目的	希土類および鉄族イオンを共添加した可視／近赤外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気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 2年 7月 1日 ～ 令和 3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:R02001）

6. 共同利用研究計画

H29～R1 年度に、Eu および Mn を異なる濃度で共添加した蛍光材料の強磁場 ESR を、260K および 4.2K で 390GHz までの範囲で行い、平均化されたスペクトルを観測し、周波数磁場ダイアグラムから g 値の決定を行った。また温度によるスペクトル形状の変化を調べ、低温で顕著なスペクトル形状の変化を見いだしたが、SQUID 磁束計による磁化率温度変化測定からは、磁気転移がないことを確認した。マージされた吸収が分裂すると思われる振る舞いを周波数変化から見出し、その振る舞いは試料ごとに異なっていることを確認した。分裂を確認するため、さらに高周波領域のスペクトルが必要で、そのための強磁場を出せるマグネットを用いてテラヘルツ領域でのスペクトル取得を目指す。得られた交換相互作用の大きさから添加イオン間の磁気的相互作用を調べ、各イオンの近接状況に関する知見を得る。これらによりイオン間のエネルギー伝達過程を明らかにする。

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）

当該期間は移動制限のため実験は行えていない。

次年度の実験に向けて、必要なセットアップについてメール会議を行った。

8. 共同利用研究の成果

メール会議の結果、常磁性共鳴であるため、THz 光源と、少なくとも 30T 前後の磁場が必要であることを見積もった。現在調整中の 55T マグネットと、BWO および遠赤外レーザーでの組み合わせで実験を行う必要があり、55T マグネット用のクライオスタット準備、光源の再立ち上げを依頼し、準備が進行している。

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

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 3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　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2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02002)

1. 共同利用研究課題名	低次元量子磁性体におけるスピンネマティック相の研究
2. 共同利用研究目的	低次元量子磁性体において最近注目されている新奇なスピンネマティック相が、どのような系で起きるのか、どのような特徴を持つかを理論的・計算科学的に予測し、具体的な物質に対する電子スピン共鳴による検証実験の実現を目指す。
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日 ～ 令和 3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	数値対角化
(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	氏　名	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

低次元量子磁性体の中でも、スピンネマティック相が実現する可能性が高いスピンラダー系、ボンド交代鎖、近藤ネックレス系に焦点をしぼり、その基底状態及び磁化過程について、ボゾン化・摂動論等の理論解析と、数値対角化等の計算科学的手法を組み合わせた総合的な解析により、実現する系とパラメータを特定するとともに、各スピンネマティック相におけるエネルギースペクトルの特徴を理論的に予測する。この段階で、神戸大学分子フォトサイエンスセンターの大久保氏を中心とする実験グループと研究打合せを行い、具体的にどのような物質に対して、どのような電子スピン共鳴実験をすれば、スピンネマティック相の特徴を捉えることができるのかをディスカッションする。このディスカッションを基に、スピンネマティック相の検証実験の実現を目指す。

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）

令和2年9月11日に坂井が神戸大学を訪問し、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2回行った。

8．共同利用研究の成果

岡本の摂動論等による理論解析と坂井の数値的厳密対角化、およびレベルスペクトロスコピー法等の有限サイズスケーリングによる解析の結果、異方性のあるボンド交代鎖および異方性のあるスピンラダー系におけるスピンネマティック相が出現するパラメータ領域を特定した。また、biquadratic 相互作用のあるスピン1反強磁性鎖の磁化過程においてスピンネマティック相が実現することを理論予測し、biquadratic 相互作用と磁化における相図を求めた。

これらのスピンネマティック相の検証実験の実現を目指して、具体的な物質や具体的な測定法について、大久保氏とディスカッションを進めている。また、電子スピン共鳴における遷移の選択則の特定を進めている。

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部提出してください。）

[1] T. Sakai: EPR Theories for Selection Rules to Observe the Spin gap, Applied Magnetic Resonance 52 (2021) 507-521.

[2]T. Sakai: Quantum spin nematic liquid in the S=1 antiferromagnetic chain with the biquadratic interaction, AIP Advances 11 (2021) 015306-1-4.

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

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 3 年 4 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　福井大学・学術研究院工学系部門
職　　名　講師
研究代表者名　守安 毅

下記のとおり令和 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

（課題番号: R02003 ）

1. 共同利用研究課題名	シリコンにおける励起子ボーズ・アインシュタイン凝縮の探索
2. 共同利用研究目的	シリコンにおける励起子は，励起子ボーズ・アインシュタイン凝縮 (BEC) が生じる候補として挙げられているが，現在のところ実現したという報告はなされていない．励起子 BEC を実現するには温度に加え，密度も正確に制御する必要がある．本研究では，電子・正孔系の密度を制御する方法として薄膜シリコンの利用を検討し，シリコンにおける励起子 BEC の実現を目指す．
3. 共同利用研究期間	令和 2 年 7 月 1 日 ～ 令和 3 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) 守安 毅	福井大学・学術研究院工学系部門	講師	実験・解析の実施
(分担研究者) 河本 敏郎	神戸大学・理学研究科	教授	共同研究における指導，成果の評価
熊倉 光孝	福井大学・学術研究院工学系部門	教授	共同研究における指導，成果の評価
佐藤 宏樹	福井大学・大学院工学研究科	修士 1 年	実験・解析の実施

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	河本 敏郎

※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: R02003 ）

6. 共同利用研究計画

当初の計画は、既存の光ポンプ・テラヘルツプローブ分光（OPTP）システムを広帯域な検出かつ高強度な励起が可能なシステムに改造し、薄膜シリコンの室温と低温での光キャリアダイナミクスの解明を行うことであったが、以下の 7. 共同利用研究の実施状況に記述するように訪学して実験することが困難な状況になったため、研究計画の見直しを行った。

共同利用研究の目的は、侵入長より厚い試料を対象に OPTP を行った場合に生じる励起光の侵入長に起因する不均一な光キャリアの空間分布による影響の解明と抑制である。見直し後の研究計画は、これまでの共同研究で問題になっていた、バルクシリコンにおいて光キャリアの不均一な空間分布に起因すると考えられる一般的なドルーデモデルからの逸脱を理論・シミュレーションによって解明することとした。

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）

福井大学におけるコロナウィルス感染拡大対策による県をまたぐ移動の自粛要請とレーザーシステムの故障により貴学での実験実施が困難となったため、センター内受入研究者の河本先生と数回にわたるメールと電話によるディスカッションにより、研究計画の見直しを行い、理論・シミュレーションによってバルクシリコンにおける光キャリアダイナミクスの解明を行うことにした。

8. 共同利用研究の成果

これまでの共同研究で、バルクシリコンを対象に光ポンプ・テラヘルツプローブ (OPTP) 測定が行なったところ、一般的なドルーデモデルでは説明できない低周波領域及び高フルエンス領域での振る舞いが確認されていた。この振る舞いの原因は、励起光の強度がシリコンを伝播中に指数関数的に減少することに起因する光励起キャリア密度の不均一な分布であると考えられる。このため、光励起されたバルクシリコンをキャリア密度が十分均一であると見なせるレイヤーに分割し、レイヤーごとに一般的なドルーデモデルによって見積もられる光学定数を単純平均して有効的な光学定数を導出することで、励起光の侵入長より厚いバルクシリコンにおける不均一な光励起キャリア密度の分布を考慮できる理論モデルを構築し、シミュレーションを行った。反射の効果を組み込むまでにはいたらなかったため、一般的なドルーデモデルと実験結果の逸脱を説明することはできなかった。構築したモデルは、反射の影響のみならず、キャリア密度や緩和時間といった特徴をレイヤーごとに組み込むことができるため、現象を上手く説明できる可能性を残している。

一方実験は、厚さ 10 μm に研磨したバルクシリコン（研磨バルクシリコン）を対象に福井大学に構築したシステムを用いて室温下で測定を行った。研磨バルクシリコンの素材は、昨年度まで使用していたバルクシリコンと同程度の電気抵抗率（≧1000 Ωcm）をもつものであったため、同じ複素屈折率を示すことが期待された。しかし THz-TDS によって観測された両サンプルの複素屈折率スペクトルは一致しなかった。この原因として、試料における反射の影響を正しく評価できていないことがあげられるが、他の可能性として研磨による体積減少のため、表面の欠陥や酸化膜による影響を大きく受けている可能性もあげられる。

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

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 3年 4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　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2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02004)

1. 共同利用研究課題名	イオン液体におけるテラヘルツ領域の分極と双極子応答に関する分子科学的研究
2. 共同利用研究目的	液体のテラヘルツ領域の双極子応答を神戸大学との共同研究で測定することにより，当研究室で測定している分極率の応答と相補的な理解が可能となります。相補的なスペクトルを得ることで，複雑凝縮相におけるより詳細な分子科学的知見を獲得することを目的とします。
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日 ～ 令和 3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

申請者と分担研究者が分子フォトサイエンス研究センター富永研究室を訪問し、実験を行うことを計画しました。H29-R1 年度の本共同利用研究プログラムにより富永研究室と共同して行い、イオン液体に関するテラヘルツスペクトルの測定条件、特に光路長と窓材（THz-TDS および FT-IR）、を決めることができました。また、R1 年に太田先生が新しく作製したエアプラズマを利用した THz-TDS（~25 – 230 cm^{-1} のスペクトル測定が可能）で得られたスペクトルをつなぐことで、5 – 700 cm^{-1} の質の非常に高い広帯域スペクトルを得ることができるようになりました。そこで R2 年度は、R1 年に申請者の研究室で新規に開発され、従来のイオン液体の粘度挙動とは異なる（アルキルチオ）アルキル基を含むホスホニウム型イオン液体について研究を行うこととしました。硫黄の導入効果を明らかにするために、アルコキシアルキル基やアルキル基を有するイオン液体（トリエチル[2-（エチルチオ）エチル]ホスホニウム、トリエチル（2-エトキシエチル）ホスホニウム、トリエチルペンチルホスホニウムの三種類のカチオンのビス（フルオロスルホニル）アミド塩：$[P_{222(2S2)}][NF_2]$、$[P_{222(2O2)}][NF_2]$、$[P_{2225}][NF_2]$）の比較を行うことを目的とし、R1 年度に行った室温での実験をベースに、温度依存性について検討を行う計画を立てました。具体的な実験の日程に関しては、これまでどおり、富永先生側とのスケジュールを打ち合わせした後、実験のために神戸大学分子フォトサイエンス研究センターを訪問することとしました。訪問は 3 回程度を予定しました。

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）

分担研究者の安藤雅俊が R2.10.20-23、R2.12.14-18、R.3.3.22-26 の三回、神戸大学富永研究室を訪問し実験を行いました。コロナ禍での年齢の点から、研究代表者である報告者が訪問することを控えました。また、分担研究者の訪問には、受入研究室の先生方とコロナの感染状況について確認し合い、最大限の注意を払い日程を決めました。

8. 共同利用研究の成果

2019 年に報告者の研究室で新規に開発された（アルキルチオ）アルキル基を含むホスホニウム型イオン液体は従来のイオン液体の粘度挙動とは異なります（*J. Chem. Eng. Data*, **2019**, *60*, 4701）。その硫黄の導入効果を明らかにするために、アルコキシアルキル基やアルキル基を有するイオン液体（トリエチル[2-（エチルチオ）エチル]ホスホニウム、トリエチル（2-エトキシエチル）ホスホニウム、トリエチルペンチルホスホニウムの三種類のカチオンのビス（フルオロスルホニル）アミド塩：$[P_{222(2S2)}][NF_2]$、$[P_{222(2O2)}][NF_2]$、$[P_{2225}][NF_2]$）の比較を行いました。図 1 に例として$[P_{222(2S2)}][NF_2]$のスペクトルを示します。スペクトルの温度依存性がはっきり分かります。報告者の研究室のフェムト秒ラマン誘起カー効果分光で測定した分極応答のスペクトルと比べて、(i) ピークが大きく異なる、(ii) スペクトルのピーク強度の温度依存性は両者で逆の傾向を示す、(iii) 温度変化によるピークシフトは両スペクトルで同じである、ということが明らかになりました。現在、データ解析を行っています。今後、分子動力学シミュレーションによる解析（分子科学研究所石田博士との共同研究）を合わせて、分子論的な理解を深め、論文にまとめる予定です。

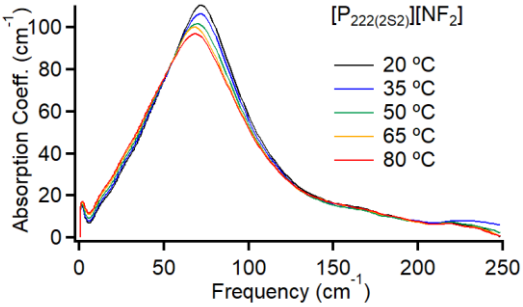


図 1. 2 台の THz-TDS（5 – 50 cm^{-1} と 50 – 250 cm^{-1}）で得られたイオン液体$[P_{222(2S2)}][NF_2]$の低振動数スペクトル。

本共同研究に際し、富永圭介先生と太田薫先生に大変お世話になりました。厚く御礼申し上げます。

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。）

現在のところ該当はありませんが，R3 年度に論文発表したいと考えています。

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。

・競争的資金の獲得

(1) 一般財団法人丸文財団・産学官交流助成金

代表者:安藤雅俊（千葉大学）

「ホスホニウムカチオン型イオン液体における硫黄置換基の液体物性への影響の分光学的考察」

様式3

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 3 年 4 月 12 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 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

（課題番号: R02005 ）

1. 共同利用研究課題名	一重項分裂の多励起子ダイナミクス評価			
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子ダイナミクス評価(電子スピン共鳴など)を行う。			
3. 共同利用研究期間	令和 2 年 7 月 1 日 ～ 令和 3 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	
中村 俊太	慶應義塾大学理工学部	大学院生	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: R02005）

6. 共同利用研究計画

一重項分裂 (Singlet Fission: SF)とは、一つの最低励起一重項状態 (S1) とその近傍に存在する基底状態(S0)の分子が相互作用することによって、相関のある三重項状態(TT)を介して二つの独立した最低励起三重項状態 ($T_1 + T_1$) を生じる光物理過程である ($S_0 + S_1 \rightarrow TT \rightarrow T_1 + T_1$)。申請者の研究室でテトラセン、ペンタセンやヘキサセンなどのアセン系分子の二量体や集合体を合成し、過渡吸収スペクトルにより基本的な励起ダイナミクスを明らかとする。一方、TT 状態での詳細な議論は時間分解電子スピン共鳴(TRESR)によって行う。

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）

R2 年度中の実績として、オンライディスカッション（6 回）、試料送付による測定（3 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

エチレングリコール (EG) を側鎖に持つペンタセン誘導体の合成に新たに成功した。そのモルフォロジーは EG 部位の数 (n) に依存する。n = 2 では固体であるのに対し、n = 3 および 4 では常温での液状を示した。粉末 X 線解析では短距離での緩い相互作用に伴う微視的なクラスター構造が観測され、一重項分裂の発現における重要な起源であることが明らかとなった。

また、オルト位とメタ位のフェニル部位で架橋されたペンタセン二量体の光誘起多励起子状態の構造と交換結合を時間分解電子スピン共鳴スペクトルのシミュレーションによって解析した。

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. Yoshino, K.; Sakai, H.; Shoji, Y.; Kajitani, T.; Anetai, H.; Akutagawa, T.; Fukushima, T.; Tkachenko, N. V.; Hasobe, T., Room-Temperature Pentacene Fluids: Oligoethylene Glycol Substituent-Controlled Morphologies and Singlet Fission. *J. Phys. Chem. B* **2020,** *124* (52), 11910-11918.

2. Kobori, Y.; Fuki, M.; Nakamura, S.; Hasobe, T., Geometries and Terahertz Motions Driving Quintet Multiexcitons and Ultimate Triplet–Triplet Dissociations via the Intramolecular Singlet Fissions. *J. Phys. Chem. B* **2020,** *124* (42), 9411-9419.

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

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 3年 4月 5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・学術院工学領域
職　　名　教授
研究代表者名　平川和貴

下記のとおり令和２年度の共同利用研究成果を報告します。

記

（課題番号:R02006）

1. 共同利用研究課題名	分光学的手法によるがん光治療薬の作用機序解明
2. 共同利用研究目的	がんの光治療への利用を目的としたポルフィリン光増感剤が生体分子を光損傷するメカニズムについて、Xバンド時間分解電子スピン共鳴分光装置を用いた測定により解明する。
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日　～　令和 3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) 平川和貴	静岡大学学術院工学領域 化学バイオ工学系列	教授	光増感剤の調製、研究の総括
(分担研究者)			

5. センター内受入研究者	研究部門・分野名	レーザー分子 光科学研究部門	氏　名	小堀 康博 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:R02006）

6. 共同利用研究計画

がん治療への応用を志向したポルフィリン光増感剤等の化合物を物性評価するため、次の研究を計画し、実行した。

・がん光治療薬への応用を目的としたポルフィリン光増感剤として、ポルフィリンP(V)錯体から構成される3量体を設計し合成した。これら光増感剤について、吸収スペクトル、蛍光スペクトルおよび蛍光寿命の測定で物性評価した。（静岡大学・平川和貴）

・上記ポルフィリン化合物の溶液を調製し（静岡大学・平川和貴）、神戸大学分子フォトサイエンス研究センターにおいて、Xバンド時間分解電子スピン共鳴分光装置を用いて分析した（神戸大学・小堀 康博 教授）。

・密度汎関数法による計算で上記化合物の構造最適化およびラジカルとなった状態の物性を解析した。これらの計算で得られたパラメータを用い、時間分解電子スピン共鳴分光で得られたスペクトルデータを解析し、励起三重項状態やラジカルの生成を評価した。

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）

2021年3月8日～9日にかけて、来学により研究を実施した。当日、試料を持参し、測定を行った。

この他、電子メールにより、計算結果および解析結果のデータを送信することで情報交換ならびに議論を行った。

8. 共同利用研究の成果

光増感物質としてポルフィリンP(V)錯体3ユニットが並行（Face to Face型）に結合したポルフィリン3量体を合成した。このポルフィリン3量体の蛍光量子収率は、リファレンス化合物であるポルフィリンモノマーとほぼ同じであった。励起一重項状態は、中央のポルフィリンユニットに局在化することが、時間分解蛍光スペクトル測定で示唆された。Xバンド時間分解電子スピン共鳴分光装置を用いた測定では、ポルフィリン3量体とポルフィリンモノマーで同様に励起三重項状態に帰属されるスペクトルが観測された。従って、ポルフィリン3量体において、励起三重項状態も、励起一重項状態と同様に中央のポルフィリンに局在化することが示唆された。

昨年度、ポルフィリン5量体において、同様の測定で、分子内電子移動を確認したが、その詳細な解析のため、ラジカルとなったポルフィリン各ユニットについて密度汎関数法で計算した。

また、がん細胞内の特徴である低pH環境を利用して光増感剤の活性制御を試みた。電子ドナーとなる芳香族アミンをリン原子の軸配位子として結合したポルフィリンP(V)錯体について、時間分解電子スピン共鳴分光測定を行った結果を再評価した。観測されたスペクトルは、励起三重項状態に帰属され、一重項の分子内電子移動は非常に速いが、三重項電荷分離状態の形成は困難であると考えられる。なお、励起三重項状態の形成が確認できたことは、光増感剤の分子設計で意義が大きい。

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。）

1 Kazutaka Hirakawa, Mariko Yamada, Shigetoshi Okazaki, Morihiko Hamada, and Yasuhiro Kobori, “Electrostatic interaction with anionic polymer activates berberine photosensitizer”, *Photomedicine and Photobiology*, 41巻, 4-7頁, 2020年.

2 Kazutaka Hirakawa, Akiko Kitagawa, Shigetoshi Okazaki, Fumitoshi Ema, and Yasuhiro Kobori, “Photosensitizing activity of berberine-cyclodextrin inclusion complexes”, *Photomedicine and Photobiology*, 40巻, 7-10頁, 2019年.

3 平川和貴，野村怜太，西村賢宣，岡崎茂俊，濱田守彦，小堀康博，“リン-フリーベースポルフィリン5量体における励起エネルギー移動と電荷分離”，日本化学会第100春季年会, 2020年3月，野田市

4 平川和貴，北川暁子，岡崎茂俊，江間文俊，小堀康博，“シクロデキストリンに包接したアルカロイド-ベルベリン類の光増感活性”，第40回日本光医学・光生物学会, 2018年7月，仙台市

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。

現在はまだ計画段階ですが、大型研究プロジェクトへの応募を検討しております。

様式3

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 3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　名古屋大学 大学院 ・ 工学研究科
職　　名　教授
研究代表者名　澤 博

下記のとおり令和2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02007)

1. 共同利用研究課題名	電気トロイダルモーメントを有する遷移金属化合物のテラヘルツ強磁場 ESR 測定			
2. 共同利用研究目的	振動外場に巨大応答が予想される電気トロイダルモーメントのテラヘルツ強磁場 ESR 測定を行い、周波数依存や圧力依存を測定し外場応答を観測する。			
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日 ～ 令和 3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) 澤 博	名古屋大学 大学院・工学研究科	教授	実験を行う	
(分担研究者) 鬼頭 俊介 萬條 太駿 原 武史 細木 雄斗	名古屋大学 大学院・工学研究科 名古屋大学 大学院・工学研究科 名古屋大学 大学院・工学研究科 名古屋大学 大学院・工学研究科	博士研究員 大学院生 大学院生 大学院生	実験を行う 実験を行う 実験を行う 実験を行う	
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ン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。

（課題番号:R02007）

6. 共同利用研究計画

昨年度に引き続き、本年度も神戸大学分子フォトンサイエンス研究センターの大久保 晋 准教授の協力の元、電気トロイダルモーメントを有する物質 $TiSe_2$ と Ta_2NiSe_5 のテラヘルツ強磁場 ESR 測定を行う。実際の実験は神戸大の大久保准教授らの指示のものと行う。ESR 測定に使用する単結晶試料はすでに合成済みであるだけでなく、Cu インターカレーションによるキャリアドーピングにも成功しているため、多くのパラメータを変化させることができる。その際、リファレンスとして、トロイダルモーメントを形成しない TiS_2 と Ta_2NiS_5 の測定も行う。これらの試料は既に合成済みである。

ESR 測定には X 線回折によって結晶方位を決定した単結晶試料を用いる。周波数については未知数なので、周波数をスキャンすることで応答を見ることから始める。また、$TiSe_2$ と Ta_2NiSe_5 は電気トロイダルモーメントの配列が、前者は反強的、後者は強的という違いがあるため、これらについての対比も極めて興味深い。

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）

新型コロナウィルスの感染拡大防止のため当該期間は移動制限がしばしばあり、直接訪問し実験を行うことができなかった。当研究課題は挑戦的な試みであることから、実験パラメータの選定が重要で実験中の検討が必要となる。それゆえ試料送付による実験では十分な内容の研究遂行が困難と判断し、メールベースの打ち合わせを行うにとどまった。

8. 共同利用研究の成果

実験実施のための実験条件等の検討をおこなうに留まった。

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。）

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

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 3 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　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 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02008)

1. 共同利用研究課題名	超伝導体/半導体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 2 年 7 月 1 日　～　令和 3 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) 内野隆司	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。ジョセフソン結合状態が達成されると，ジョセフソン渦糸が系内に形成されるので，その磁束が ZFC/FC 過程で不可逆な磁化となって現れる。この実験を様々な外部磁化のもとで行うことにより，不可逆温度（T_{irr}, irreversible temperature）の磁場依存性を観察する。また，昨年度の実験から，上記超伝導体/半導体ナノコンポジットが，超伝導転移温度以下で，磁束量子の高密度化に由来すると考えられる常磁性磁化をしめすことを確認した。そこで，本研究では，磁化および不可逆温度の磁気応答をさらに詳しく観察することで，ジョセフソン渦糸の磁場応答特性，磁気構造を明らかにする。

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

超伝導/常伝導体界面の弱結合部分に形成されるジョセフソン結合領域の渦糸の生成過程，および磁場応答過程については不明な点が多く，これまで殆ど研究が進んでいない。ジョセフソン結合領域は通常，トンネル接合により作製される。しかし，この場合，その領域が数 nm 以下であるので，その磁気構造を実験的に観測するのが困難である。今回作製する試料では，ジョセフソン結合領域がサブミクロンという幅広い領域にわたっているため，磁化の観測が容易である。本研究により，ジョセフソン結合領域の巨視的，微視的な磁気構造が明らかとなれば，まだ未知の点が多い弱結合界面の磁気構造に関する新しい知見が得られるばかりでなく，同界面に由来する新しい量子現象の発見にもつながると期待される。本研究の結果，超伝導体が常伝導相中にフラクタル的に分散した際に，非常に強いジョセフソンネットワークが形成されることが明らかとなった。さらに，同試料内に希薄に分散した強磁性成分に由来する磁束が超伝導転移温度以下で自発的に量子化され，渦糸を形成することを磁化測定により確認した。

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。）

学会発表
応用物理学会　秋季学術講演会　1件　春季学術講演会　1件
日本セミックス協会　秋季シンポジウム　1件　　年会　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。

応用物理学会春季学術講演会における講演により寺町七海（博士前期１年）が講演奨励賞を受賞した。

様式3

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 3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　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2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02009)

1. 共同利用研究課題名	水分子が高分子材料の結晶化プロセス・相分離プロセスに及ぼす影響の解明
2. 共同利用研究目的	わらびもちの形成プロセスの解明というテーマで研究を行った。本年度は、さらに吸水性高分子であるPMMAや生分解性高分子であるPLA材料が水分子の影響で結晶化や相分離に及ぼす影響を評価する。
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日 ～ 令和 3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) 松葉 豪	大学院有機材料システム研究科	教授	実験の企画, 実施, とりまとめ
(分担研究者) 村山 駿介	大学院有機材料システム研究科	M1	実験の実施

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:R02009）

6. 共同利用研究計画

【背景】

高分子材料を実際に利用するに当たり、水分との相互作用は非常に重要なパラメータである。吸水・脱水に伴い高分子材料が膨張／収縮による劣化挙動、逆に水を利用した可塑化などの高分子の機能を向上させるために利用されている。我々のグループでは、水による材料の構造の変化についてこれまで測定を行っており、例えば昨年度はわらびもちの構造解析というテーマで澱粉中に含まれる水分子による結晶ラメラ、結晶高次構造の変化を評価しており、THz ラマン測定でも水分子による構造変化に伴うスペクトルの変化を測定、評価することに成功した。構造と分光の相関を明らかにすることは、高分子の機能を理解する上で重要であることがわかった。

【研究内容】

今回は乾燥フィルム、湿潤（吸水させた）フィルムに熱処理を施したサンプルについて THzラマンを用いた測定実験を行う予定である。また、In-situ でのラマン測定も同時に行い、昇温プロセス中でのスペクトルの変化を明らかにする。また、PLA においても水分により結晶化が促進されることを示しており、種々の核剤を入れた系での測定を行う。サンプルはあらかじめ山形大学で作製しておく。

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）

3月末に、神戸大学に村山とともに訪問し、実際に実験を行った。

8. 共同利用研究の成果

実際に実験を行い、種々のフィルムの結晶構造と相分離構造との相関を評価した。例えば、結晶性ポリスチレンとポリフェニレンエーテルのブレンドでは、結晶性ポリスチレンのα晶による結晶だけではなくて、相分離したあとに観測されるγ晶由来のピークを観測することができた。来年度に向けて、In-situ 測定による構造変化を測定し、バンドの帰属なども行うことができると期待している。

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）

現在データ取りまとめ中である。来年度には執筆する予定である。

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。

特に無し。

様式３

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　3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　　神戸大学･大学院理学研究科
職　　名　　准教授
研究代表者名　　高橋　一志

下記のとおり令和　2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

（課題番号:R02010）

1. 共同利用研究課題名	複合機能性スピンクロスオーバー錯体のテラヘルツ ESR による磁気特性評価
2. 共同利用研究目的	X バンド ESR ではスペクトルの分離が不可能である複合機能性スピンクロスオーバー錯体の中心金属の d スピンとπラジカル由来のπスピンの磁気異方性やスピン間相互作用を明らかにする。
3. 共同利用研究期間	令和　2年　7月　1日　～　令和　3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) 高橋　一志	神戸大学大学院理学研究科	准教授	研究総括
(分担研究者) 東　亮介	神戸大学大学院理学研究科	修士1年	実験

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

※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:R02010）

6. 共同利用研究計画

申請者グループで合成した複合機能性スピンクロスオーバー錯体の多結晶サンプルの磁気評価のため、神戸大学分子フォトサイエンス研究センターの SQUID 磁束計を用い、1.8-300 K までの磁化の温度依存性、5 T までの磁場依存性の測定を行う。測定のための光照射条件の検討を行うため、光照射前後の結晶構造解析と振動分光を行う。試料整形を行うため、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フォルダー等を実物確認、ならびに最適な温度、磁場ー周波数領域を打合せする。実験では信号強度、共鳴磁場、吸収強度を調整するため、室温から減圧ヘリウム温度 1.8 K までの測定を行い、低温で周波数依存性を測定し、エネルギー依存性を測定する。

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）

MPMS の利用

8. 共同利用研究の成果

ハロゲン結合相互作用を導入したスピンクロスオーバーカチオンとニッケルジチオレンπラジカルアニオンからなる複合機能性錯体におけるスピンクロスオーバー転移とスピン一重項転移の協同的磁気転移を研究代表者はこれまでに報告し、当該金属錯体には励起波長により異なる光誘起準安定状態が存在することが磁化測定から示唆されている。一昨年度光照射後の結晶構造解析と振動分光を検討したが、より薄い単結晶が必要であることが明らかとなった。結晶作成条件を検討し、磁化測定から十分薄い単結晶サンプルの作製に成功した。昨年度はこの金属錯体の十分薄い単結晶を用い、532 nm 光照射後の光誘起準安定状態と急冷相の結晶構造解析に成功した。今後、850 nm 励起での準安定相の構造解析も検討し、複数の光誘起準安定状態のスピン状態を明らかにするため、X バンド ESR とテラヘルツ強磁場 ESR 温度依存性の温度依存性の測定も検討していく。また、テラヘルツ ESR 測定に最適なサンプルを探索するために、様々なスピンクロスオーバー錯体の多結晶や薄膜の磁化の温度変化を SQUID 磁束計を用いて測定し、室温スピンクロスオーバーについて論文発表した。

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。）

「学会発表」

(1) 長鎖アルキル鎖を導入した鉄(III)スピンクロスオーバー錯体からなる薄膜の作製と性質，○東 亮介，高橋 一志，櫻井 敬博，太田 仁，日本化学会第 101 春季年会，口頭 A03-3pm-04，オンライン，2021 年 3 月

(2) アゾビスフェノレート配位子を有する Ni(III)錯体の構造と性質，上田 啓示，宮脇 敦大，櫻井 敬博，太田 仁，○高橋 一志，日本化学会第 101 春季年会，口頭 A03-3pm-03，オンライン，2021 年 3 月

(3) Spin crossover induced Linkage Isomerism in a Neutral Heteroleptic Iron(III) Complex, ○Kazuyuki Takahashi, Atsuhiro Miyawaki, Kazuo Eda, Tomoyuki Mochida, Takahiro Sakurai, Hitoshi Ohta, Takahito Nakajima, The 1st Asian Conference on Molecular Magnetism, Oral, Online, March 2021

(4) 八面体型アニオンを持つ鉄(II)錯体におけるスピンクロスオーバー誘起構造転移，○東 亮介，高橋 一志，櫻井 敬博，太田 仁，第 10 回 CSJ フェスタ 2020，ポスターP1-060，オンライン，2020 年 10 月

(5) 八面体型アニオンを持つ鉄(II)錯体におけるスピンクロスオーバーに伴う構造転移，○東 亮介，高橋 一志，櫻井 敬博，太田 仁，分子科学会 オンライン討論会，口頭 3C08，オンライン，2020 年 9 月

「論文発表」

(1) "The Impact of the Next-Nearest Neighbor Dispersion Interactions on Spin Crossover Transition Enthalpy Evidenced by Experimental and Computational Analyses of Neutral π-Extended Heteroleptic Fe(III) Complexes"
A. Miyawaki, T. Mochida, T. Sakurai, H. Ohta, K. Takahashi
Inorg. Chem., *59*, 12295-12303 (2020).

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。

東 亮介
第 10 回 CSJ フェスタ 2020 優秀ポスター発表賞
「八面体型アニオンを持つ鉄(II)錯体におけるスピン クロスオーバー誘起構造転移」

様式3

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 3 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　北海道大学大学院理学研究院
職　　名　准教授
研究代表者名　吉田　紘行

下記のとおり令和 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

（課題番号: R02011 ）

1. 共同利用研究課題名	カゴメ格子反強磁性体の高圧下テラヘルツ ESR と磁化測定による研究
2. 共同利用研究目的	カゴメ反強磁性体において高圧下磁化測定及び常圧・高圧下テラヘルツ ESR 測定を行い、磁気基底状態に対する DM 相互作用の影響と圧力効果を明らかにする。
3. 共同利用研究期間	令和 2 年 7 月 1 日　～　令和 3 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	准教授	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:　R02011 ）

6. 共同利用研究計画

$CaCu_3(OH)_6Cl_2 \cdot 0.6H_2O$ の単結晶及び $Li_2Cr_3SbO_8$ の粉末試料に対する高圧下 ESR 実験、高圧下磁化測定を行う。ESR 実験では信号強度、共鳴磁場、吸収強度を調整するため、室温から減圧ヘリウム温度 1.8K までの測定を行い、低温で周波数依存性、エネルギー依存性を測定する。ESR、磁化測定ともに圧力は最大で 2.5 GPa まで印加する。

$CaCu_3(OH)_6Cl_2 \cdot 0.6H_2O$ の厚さ 0.1 mm 程度の薄く良質な単結晶試料を合成し、電磁波透過効率の向上を図る。高精度の ESR 実験を行い、カゴメ反強磁性体の基底状態に対する異方性、DM 相互作用及び圧力効果を明らかにする。磁化測定は高圧セルを用いて SQUID 磁束計により行う。

一方、$Li_2Cr_3SbO_8$ については引き続き磁場配向試料の作成を進め、完了次第圧力下磁化測定、圧力下 ESR 測定を行う計画である。配向については磁場中試料回転の方法や磁場強度、温度などを検討し、精密化する。

また、近年カゴメ反強磁性体の磁気秩序状態に定義されるトロイダルモーメントに由来して、電磁波の方向二色性が生じる可能性が提案されている。本年度の研究計画では上記 2 つのカゴメ反強磁性体の ESR 測定の際に、合わせて光の吸収強度の方向依存性を測定し、二色性を検証する。

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）

コロナ禍による活動制限のため、研究代表者が神戸大学において実験を行うことはできなかったが、オンラインネットワークを利用し、複数回にわたり研究内容のディスカッションを行ない、理解を深めることが出来た。

8. 共同利用研究の成果

受け入れ共同研究者の協力により、送付試料の磁場配向など本測定に向けた予備実験を進めた。結果として磁場配向試料はまだ完成していないが、配向試料作成についてのいくつかの知見を得ることが出来た。また、光の方向二色性についての議論を重ね、測定試料に対する磁場印加方向、トロイダル双極子の秩序方向、方向二色性の応答方向について検討し、令和 3 年度以降の研究において速やかに実験を始められるよう準備を進めることが出来た。

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

1. $S = 1/2$ カゴメ格子反強磁性体 Ca-kapellasite の圧力下の帯磁率測定

鈴木哲平,齋藤佑，原茂生，櫻井敬博，大久保晋，太田仁，赤木暢，鳴海康雄，萩原政幸，吉田紘行

第五回西日本強磁場科学研究会　2018　9/6

2. $S = 1/2$ カゴメ格子反強磁性体 Ca-kapellasite の圧力下の磁性

鈴木哲平，斎藤佑，原茂生，櫻井敬博，大久保晋，太田仁，赤木暢，鳴海康雄，萩原政幸，吉田紘行

日本物理学会 2018 年秋季大会　2018 9/9

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

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 3年 4月 20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　奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科
職　　名　教授
研究代表者名　山田 容子

下記のとおり令和2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号: R02012)

1. 共同利用研究課題名	有機薄膜太陽電池の電荷キャリアダイナミクスの解明			
2. 共同利用研究目的	本研究では、申請者が作製したジケトピロロピロール連結テトラベンゾポルフィリンとフラーレン誘導体とのバルクヘテロ接合型薄膜試料について、時間分解テラヘルツ分光法により電荷キャリアの移動度を測定し、そのダイナミクスの詳細を解明する。ここでは特にテラヘルツ分光法により観測される局所的な移動度と長距離的な電荷輸送の違いに着目し、そのメカニズムについて考察する。			
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日　～　令和 3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) 山田 容子	奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科	教授	取りまとめ	
(分担研究者) 松尾 恭平	同上	助教	素子作製	
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	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。

（課題番号: R02012）

6. 共同利用研究計画

本共同利用研究では、ジケトピロロピロール誘導体を連結したテトラベンゾポルフィリン薄膜試料とフラーレン誘導体とのバルクヘテロ接合型薄膜試料に対して、光ポンプ－テラヘルツプローブ分光法により、電荷キャリアダイナミクスの計測を行う。特に分子構造や結晶構造の違いが電荷キャリアの移動にどのような影響を及ぼすかについて明らかにする。また、テトラベンゾポルフィリン誘導体を用いたサブマイクロ秒領域の電荷キャリア移動度測定の結果と光ポンプ－テラヘルツプローブ分光法による電荷キャリアダイナミクスの測定結果と比較することにより、局所的な移動度と長距離的な電荷輸送の違いや分子配列やモルフォロジーとの関係を明らかにすることを目指す。

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）

測定が長期にわたるため、当研究室で試料を作成し、神戸大学に送付することにより、実験を行った。また、本共同研究の結果について、メールで進捗状況の報告を受け、論文作成についての議論を行った。

8. 共同利用研究の成果

今年度は昨年度に引き続き、アルキル基の長さが 10 の場合のジケトピロロピロール連結テトラベンゾポルフィリン(C10-DPP-BP)と PCBM とのバルクヘテロ接合型薄膜試料について、時間分解テラヘルツ分光法により、電荷キャリアの移動度の時間変化やスペクトルを測定した。これまでの研究からこのバルクヘテロ接合型薄膜試料ではC10-DPP-BPが基板に対して、垂直に配列するため、アルキル基の長さが4の場合のC4-DPP-BP を用いた薄膜試料に比べて、基板に水平方向に対する電荷キャリアの移動度が大きくなることが予想される。これはテラヘルツ分光法で観た場合、基板に対して光電場が水平方向に変化するため、その方向の電荷キャリアの移動に敏感であるためである。しかし、実験結果はこの予想に反し、C10-DPP-BPとC4-DPP-BP を用いたバルクヘテロ接合型薄膜試料で移動度や時間変化に大きな違いは観測されなかった。このことは数ナノメートルレベルの局所的な空間スケールでは、電荷キャリアの移動度が分子配列やモルフォロジーに大きく依存しないことを意味している。また、マイクロ秒以降の時間領域で得られた移動度の値と比べても数桁大きいという結果も合わせて考えると、100 ピコ秒以内の電荷キャリアの動的な性質はこれまでに知られている遅い時間スケールでの振る舞いと大きく異なることがわかった。

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部提出してください。）

“Dynamic Behavior of Photogenerated Charge Carriers in Diketopyrrolopyrrole-Linked Tetrabenzoporphyrin-Based Bulk Heterojunction Thin Films Probed with Time-Resolved Terahertz Spectroscopy” Kaoru Ohta, Yuichi Hiramatsu, Kohtaro Takahashi, Mitsuharu Suzuki, Hiroko Yamada, and Keisuke Tominaga, J. Photochem. Photobio. A, 400, 112693 (2020)

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

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 3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　山形大学・大学院理工学研究科
職　　名　准教授
研究代表者名　小池 邦博

下記のとおり令和2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02013)

1. 共同利用研究課題名	テラヘルツESRによる$Nd_2Fe_{14}B$/Mo/Fe系ナノコンポジット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Nd-Fe-B/Mo/Fe系合金ナノコンポジット膜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Mo中間層の有無がNd-Fe-B層とFe系合金層間の交換結合状態に与える影響を検討する。
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日 ～ 令和 3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)	山形大学学術研究院	准教授	研究総括
(分担研究者) 加藤 宏朗 内田 徳之助 古澤 皐平 常澤 佑太	山形大学学術研究院 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 山形大学大学院理工学研究科	教授 修士2年 修士2年 修士1年	解析 解析 実験 実験

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。

（課題番号:R02013）

6．共同利用研究計画

本申請課題を実施するため、H29-R2 年度に実施された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フォ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 測定験・解析結果からハード/ソフト相情報のスペクトル分離と磁化過程の関係について考察してきた。そこで、本年は膜垂直と面内方向に磁化容易軸をもつ 2 つの Nd-Fe-B ナノコンポジット積層膜における異なる非磁性 Mo 中間層厚さを持つハード/ソフト磁性積層膜について室温から 4.2 K までの信号強度、共鳴磁場、吸収強度等に関するより詳細な調整を行って Nd-Fe-B 層と Fe 系合金層間の交換結合状態を明らかにし、且つ低温から室温までの磁化測定から保磁力機構を明らかにする。

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を神戸大学分子フォトセンターへ試料送付し、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

積層型ナノコンポジット磁石膜のハード相の磁化容易軸である *c* 軸を配向制御し、且つハード/ソフト層間を適切な交換結合状態とするために両層間の平坦な界面状態を維持させる 2 ステップ法を用いて形成された膜面内と膜垂直方向へ異方化された Nd-Fe-B/Mo/Fe 積層膜における ESR，SQUID 測定とマイクロマグネティックスシミュレーションから得られた磁化過程の解析結果からハード/ソフト相情報と磁化過程の関係について考察した。形状磁気異方性の効果も相まって反磁界の影響が大きな異方化された試料における減磁曲線に現れるハード相とソフト相由来のステップの出現の有無は、ハード相の磁化容易軸の分散状態とハード/ソフト相間の交換結合状態に支配されることが明らかとなった。

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。）

1. 古澤皐平，小池邦博，加藤宏朗，稲葉信幸，古賀詩悠，板倉 賢，齋藤 佑，大久保晋，太田 仁，3D シードを導入した Nd-Fe-B 薄膜の垂直磁気異方性に与える Nd-Fe-B 堆積温度の影響，第 167 回日本金属学会 2020 年秋期大会 2020 年 9 月 15 日(火) ～ 9 月 18 日(木)（オンライン会議，ZOOM）.
2. 内田徳之助，櫻井慧歩，小池邦博，加藤宏朗，稲葉信幸，板倉 賢，原 茂雄，齋藤 佑，大久保晋，太田 仁，赤外レーザーアニールした Nd-Fe-B/Mo/FeCo ナノコンポジット積層膜の磁気特性，第 167 回日本金属学会 2020 年秋期大会 2020 年 9 月 15 日(火) ～ 9 月 18 日(木)（オンライン会議，ZOOM）.
3. K. Koike, K. Ohashi, T. Suzuki, C. Okita, N. Inaba, H. Kato, M. Itakura, S. Hara, Y. Saito, S. Okubo, and H. Ohta, “Effect of Mo Monoatomic Interlayer on Magnetic Properties of In-Plane Anisotropic Nd-Fe-B/Mo/FeCo Nanocomposite Multilayered Films”, 2020 Magnetic Materials and Magnetism (MMM) Conference, November 2-6, 2020, online.
4. 常澤佑太，小池邦博，水野善幸，板倉 賢，大久保晋，土浦宏紀，加藤宏朗，MgO(001)/Mo 上に形成された $SmFe_{12}$ 薄膜の磁気特性，第 168 回日本金属学会 2021 年春期大会 2021 年 3 月 16 日(火) ～ 3 月 19 日(金)（ZOOM オンライン）.
5. K. Koike, K. Ohashi, T. Suzuki, C. Okita, N. Inaba, H. Kato, M. Itakura, S. Hara, Y. Saito, S. Okubo, and H. Ohta, Effect of Mo Monoatomic Interlayer on Magnetic Properties of In-Plane Anisotropic Nd-Fe-B/Mo/FeCo Nanocomposite Multilayered Films, AIP Advances **11**, (2021) 015134-1-015134-5.

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

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 3年 4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　新居浜工業高等専門学校・生物応用化学科
職　　名　准教授
研究代表者名　橋本 千尋

下記のとおり令和2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02014)

1. 共同利用研究課題名	広帯域誘電分光法による二次元層状リン酸ジルコニウムの層間イオン伝導についての研究
2. 共同利用研究目的	層間水が二次元層状プロトン型リン酸ジルコニムのイオン伝導に与える影響について広帯域誘電分光法を用いて考察を行う。
3. 共同利用研究期間	令和 3年 7月 1日 ～ 令和 3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) 橋本 千尋	新居浜工業高等専門学校	准教授	物性測定・テラヘルツ時間領域分光測定
(分担研究者)			
中山 享	新居浜工業高等専門学校	教授	試料作製・物性測定
張 峰	神戸大学大学院	助手	量子化学計算
佐藤 春実	神戸大学大学院	教授	テラヘルツ時間領域分光測定
富永 圭介	神戸大学大学院	教授	テラヘルツ時間領域分光測定

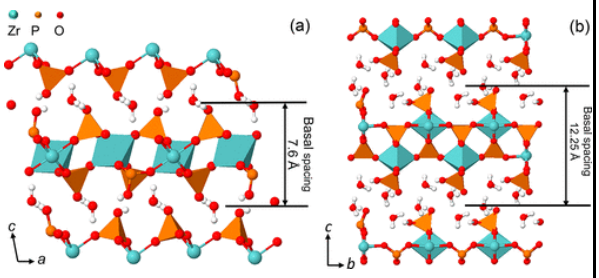
5. センター内受入研究者	研究部門・分野名	テラヘルツ分子化学研究部門	氏 名	佐藤 春実

※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:R02014）

6. 共同利用研究計画

$Zr(HPO_4)_2 \cdot nH_2O$ 組成からなる二次元層状構造のリン酸ジルコニウムは以前からよく知られた物質であり、ZrO_6 と PO_4 から構成される層の間に、2 つの H^+と数個の H_2O が存在する。右図に示すように α 型は 1 個の H_2O が、γ 型は 2 個の H_2O が存在しており、室温でもイオン伝導が観測される。しかしながら、熱処理などで層間の H_2O を取り去ると室温でのイオン伝導が観測されなくなる。このように層間でのイオン伝導には、層間水が影響することがわかっているが、その伝導機構は現時点では明らかにできていない。本研究では、層間という制限空間に捕捉された水の運動とその分子間相互作用に関して、温度可変テラヘルツ(THz)時間領域分光および X 線結晶構造解析、量子化学計算により調べ、イオン伝導現象の解明の一助になることを目的とする。



Structures of (a) α-ZrP and (b) γ-ZrP
Inorg. Chem. 2018, 57, 4370−4378

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）

本年度は新型コロナウィルスのため来学できなかったため、以下のように試料送付および電子メールによるディスカッション（約 10 回）により研究を実施した。THz スペクトルの測定については、静岡大学の佐々木哲朗教授にも協力いただくことになった。

5 月： リン酸ジルコニウムの層状構造タイプ（略称:CZP）2 種の送付 （新居浜高専→神戸大学・静岡大学）
二次元層状構造の層間に、H^+ 2 個と H_2O 1 個が存在するもの CZP-100 α-$Zr(HPO_4)_2 \cdot H_2O$
二次元層状構造の層間に、H^+ 2 個と H_2O 2 個が存在するもの CZP-200 γ-$Zr(HPO_4)_2 \cdot 2H_2O$

6-10 月： CZP-100・CZP-200 の 70 K～300 K における THz スペクトルの測定 （神戸大学・静岡大学）
THz スペクトル測定後の CZP-100・CZP-200 の送付 （静岡大学→新居浜高専）
THz スペクトル測定前後の CZP-100・CZP-200 の X 線回折・TG-DTA 物性測定 （新居浜高専）

11-3 月： CZP-100・CZP-200 の固体密度汎関数法を用いた量子化学計算 （神戸大学）

8. 共同利用研究の成果

【CZP-100（1 水和水）の層間水】

9.1 wt% CZP-100（ポリエチレンにより希釈）の THz スペクトルから、冷却直後の 70K と、一度昇温してからの 70K のスペクトルが 5 THzあたりで少し変化していることが分かった。昇温過程の 300K 近傍で変化している可能性がある。また、TG-DTA 測定では、静岡大学で測定した後の 9.1wt%CZP-100 の層間水は 0.83 個であることがわかった。

【CZP-200（2 水和水）の層間水】

3.2 wt% CZP-200 の THz スペクトルから、冷却直後の 70K と、一度昇温してからの 70K のスペクトルが 4～5THzあたりで変化していることがわかった。昇温過程の 300K 近傍で変化した可能性がある。TG-DTA 測定では、静岡大学で測定した後の 9.1wt%CZP-200 の層間水は 1.65 個であることがわかった。

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

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 3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　東京工業大学・科学技術創成研究院
職　　名　教授
研究代表者名　東 正樹

下記のとおり令和 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02015)

1. 共同利用研究課題名	鉛-3d 遷移金属ペロブスカイト化合物の系統的な価数変化の ESR 研究			
2. 共同利用研究目的	鉛-3d 遷移金属ペロブスカイト化合物中の、遷移金属元素の系統的な価数変化を ESR で明らかにする			
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日 ～ 令和 3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)	科学技術創成研究院	教授	研究統括、試料合成	
(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:R02015 ）

6. 共同利用研究計画

高圧合成で得られる $Bi_{0.5}Pb_{0.5}MO_3$ (M=Cr, Fe, Mn, Co)には、$Bi^{3+}{}_{0.5}Pb^{4+}{}_{0.5}M^{3.5+}O_3$, $Bi^{3+}{}_{0.5}Pb^{2+}{}_{0.25}Pb^{4+}{}_{0.25}Mn^{3+}O_3$、$Bi^{3+}{}_{0.5}Pb^{4+}{}_{0.5}Mn^{2.5+}O_3$の3つの電荷分布が考えられる。結晶構造解析とESR測定を組み合わせて、価数の決定ならびに磁気秩序について調べる。

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）

$[Cu(4,4'-Me_2-bpy)(H_2O)]_2[VO_2F_8]$、$[Cu(5,5'-Me_2-bpy)(H_2O)]_2[VO_3F_7]$の試料を送付して ESR 測定を依頼した。測定のために神戸大を 1 回訪問、さらに相談のために、オンラインディスカッションを 1 回行った。

8. 共同利用研究の成果

高圧合成した $Bi_{0.5}Pb_{0.5}MO_3$ (M=Fe, Ni)試料を用い、SPRing-8 の BL46XU で室温の HAXPES 測定を行った。$Bi_{0.5}Pb_{0.5}FeO_3$ では Bi^{3+}, Pb^{2+}, Pb^{4+}の成分が観測されており、$Bi^{3+}{}_{0.5}Pb^{2+}{}_{0.25}Pb^{4+}{}_{0.25}Fe^{3+}O_3$ の特徴的な電荷分布を持つ事が分かった。また、$Bi_{0.5}Pb_{0.5}NiO_3$ では Bi^{3+}と Bi^{5+}の両方が観測されており、$Bi^{3+}{}_{0.25}Bi^{5+}{}_{0.25}Pb^{4+}Ni^{2+}O_3$ である事がわかる。即ち、Mn, Fe, Ni と、d 軌道が深くなることで遷移金属の価数が 3.5+, 3+, 2+と減少し、また、Bi が 3+から 5+へ価数が増えるよりも早く、Pb が 2+から 4+へと変化する傾向がある。

また、ノースウエスタン大学で新しく合成された新規化合物$[Cu(4,4'-Me_2-bpy)(H_2O)]_2[VO_2F_8]$の磁性を調べた。いずれも S=1/2 を持つ Cu^{2+}と V^{4+}が F^-を介して結合した、Cu_2V_2 テトラマーを持つ。磁化率温度変化と強磁場磁化過程から 70K 程度のスピンギャップと $4m_B$ の飽和磁化が観測され、非磁性のシングレット基底状態である事がわかっている。一方$[Cu(5,5'-Me_2-bpy)(H_2O)]_2[VO_3F_7]$では 1.5 μ_B の飽和磁化が観測されており、フリースピンの存在が示唆される。ESR 測定によってシングレット成分とフリースピン成分を観測して、この化合物の磁性を明らかにする事を試みている。

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。）

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

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 3 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　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 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02016)

1. 共同利用研究課題名	多重極限テラヘルツ ESR による $CsFeCl_3$ の圧力誘起秩序相における磁気励起の研究
2. 共同利用研究目的	多重極限テラヘルツ ESR(ハイブリッド圧力セル)を利用した $CsFeCl_3$ の強磁場・高圧下における特異な磁気励起の探査に関して、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 2年 7月 1日 ～ 令和 3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

※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:R02016）

6．共同利用研究計画

三角格子反強磁性体のノンコリニアな秩序において期待される新規な磁気励起の観測に向けて、神戸大学分子フォトサイエンス研究センター所有の装置を確認、ならびに最適な温度、磁場ー周波数領域、圧力領域を打合せする。そしてこれらの打ち合わせに沿って実験を行い、新規な磁気励起モードの探索を行う。観測された ESR について量子論的計算を駆使して解析し、磁場中で励起モードがどのように変移してゆくか、詳しく調べる。

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）

新型コロナウィルス感染防止のため、神戸大学への訪問はありません。一方、電子メールを通じて資料送付を行い、実験結果と理論計算の結果について議論を行った（5 回）。

8．共同利用研究の成果

三角格子反強磁性体 $CsFeCl_3$ に関する研究に優先して、関連する研究課題であり、以前に共同研究を実施していた $KCuCl_3$ の圧力誘起磁気秩序に関して理論計算し、実験データとの比較検討を詳しくおこなった。そこでは、光の磁場成分による通常の励起だけでなく、$TlCuCl_3$ において提案されている電場成分による磁気励起も考慮に入れ、結晶の対称性に基づいて遷移強度を計算した。その結果、実験結果を定量的に再現できることが示された。圧力によって磁気秩序が形成された量子臨界点近傍においては、磁気モーメントの大きさの揺らぎに対応したヒッグス振幅モードの存在が理論的に知られている。このヒッグス振幅モードが、圧力を詳細に制御した ESR によって初めて検出されたことを明らかにし、共同研究成果として学術論文を出版した。これにより、ESR が振幅モードの検出にも応用でき、そこでは光の電場成分による励起が大きく関与している新たな知見を示した。

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。）

First ESR Detection of Higgs Amplitude Mode and Analysis with Extended Spin-Wave Theory in Dimer System $KCuCl_3$
M. Matsumoto, T. Sakurai, Y. Hirao, H. Ohta, Y. Uwatoko, and H. Tanaka
Appl. Magn. Reson. **52**, 523 (2021) (42 pages).

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

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 3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　青山学院大学 理工学部物理・数理学科
職　　名　助教
研究代表者名　山本大輔

下記のとおり令和2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02017)

1. 共同利用研究課題名	圧力下テラヘルツESR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	三角格子反強磁性体 $CsCuCl_3$ に対し、近年圧力下で見出された同物質の 1/3 磁化プラトー現象の起源を、理論研究と、圧力下テラヘルツESRによる実験的研究の両面から明らかにする。
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日 ～ 令和 3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	青山学院大学 理工学部 物理・数理学科	助教	理論解析・研究総括
(分担研究者) Giacomo Marmorini	青山学院大学 理工学部 物理・数理学科	研究員	理論解析・数値シミュレーション
太田 陽	青山学院大学 理工学部 物理・数理学科	博士前期2年	数値シミュレーション
宮﨑優希	青山学院大学 理工学部 物理・数理学科	博士前期1年	解析計算・数値計算
山田一志	青山学院大学 理工学部 物理・数理学科	博士前期1年	解析計算
茂木隼人	青山学院大学 理工学部 物理・数理学科	博士前期1年	数値シミュレーション

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:R02017）

6. 共同利用研究計画

三角格子反強磁性体 $CsCuCl_3$ の圧力下で発現する 1/3 磁化プラトーの起源解明に向けて、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。本年度は昨年度までの研究で判明した模型パラメータを元に数値計算を行い、実験で得られた磁化曲線などが再現されるかを確認する。また、圧力効果による量子性（量子ゆらぎ）の制御という新しい視点で本結果を解釈・議論し、学会発表・論文執筆を通して広く公開する。

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）

オンライディスカッション（3 回）

8. 共同利用研究の成果

初年度の研究では、圧力下テラヘルツ ESR による反強磁性ギャップの圧力依存性、磁化率の圧力依存性の測定を行い、4 つの相互作用を分離して評価する試みを行った。分子場近似および部分的な量子補正の効果の検討を行ったが、常圧下での既知の量とは完全には矛盾ない値を得るには至らなかった。昨年度は実験の再現性等をまずはチェックし、得られた実験結果を矛盾なく説明する理論モデルの構築、量子効果を完全に考慮した理論計算等により、1/3 磁化プラトー出現に寄与するパラメータを見出した。本年度はこれらのパラメータを元に数値計算を行い、実験で得られた磁化曲線が再現されることを確認し、また、圧力によって物質内で古典-量子クロスオーバーが起こっていることを明らかにした。これは外部的な圧力によって物質の量子性を能動的にコントロールできるという非常に魅力的な事実を示唆している。

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。）

山本大輔、櫻井敬博、大久保晋、太田仁
「三角格子反強磁性体 CsCuCl3 の高圧下磁化過程に対する理論解析と量子性の制御 II」
『日本物理学会 2020 年秋季大会』、領域 3, 9aC1-7、オンライン、2020 年 9 月

山本大輔、櫻井敬博、大久保晋、太田仁
「圧力を用いた結合スピン鎖物質の量子性の制御：CsCuCl3 の場合」
『第4回スピン系物理研究会 「スピン系研究の開拓前線」』、オンライン、2020 年 11 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。

様式3

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 3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　九州大学・工学研究院
職　　名　助教
研究代表者名　稲垣祐次

下記のとおり令和2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02018)

1. 共同利用研究課題名	テラヘルツ ESR 分光を用いた三角スピンリングにおけるカイラル揺らぎ		
2. 共同利用研究目的	テラヘルツ ESR 分光により、S=1/2 三角スピンリングで期待されるスピンカイラリティに起因する揺らぎの観測を目指す		
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日 ～ 令和 3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)	九州大学工学研究院	助教	総括
(分担研究者) 宮川 一慶 永石 誠之助	九州大学工学府 九州大学工学府	D1 M1	実験補助・データ解析 実験補助・データ解析

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。

（課題番号:R02018）

6. 共同利用研究計画

正三角スピンリング反強磁性体のモデル物質である $KBa_3Ca_4Cu_3V_7O_{28}$ について、詳細な ESR の温度依存性をいくつかの磁場の下で測定することにより、本系で期待されるカイラル揺らぎと通常の温度揺らぎの分離を試みる。本研究のカイラル揺らぎは大変小さいと予想されるので、周波数、磁場、試料配置、分解能など測定パラメータを精密制御して、最適化させた測定を行う必要がある。

申請者グループが純良試料合成を行い、基礎物性である X 線回折実験、磁化測定等で磁気的振舞のチェックを行い、その後、神戸大学分子フォトサイエンス研究センターにてテラヘルツパルス強磁場 ESR 測定を行いカイラル揺らぎと通常の温度揺らぎの分離をする。

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）

研究計画にあるように、結晶の精密制御が必要なため、神戸大に来訪し直接実験を行う必要がある。昨年度は新型コロナウィルス感染拡大防止により往来が止められていた為、研究遂行することができなかった。

8. 共同利用研究の成果

新型コロナウィルス感染拡大防止により往来が止められていたため、共同利用を活用して実験を遂行するために神戸大に訪問することができなかった。

従って、令和 2 年度は共同利用研究を直接実施することはできなかった。その代わり、オンラインで 3 回打ち合わせを行い、共同利用研究実施に向けた準備状況や今後の研究計画について共有した。

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。）

準備中

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

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 3 年 4 月 23 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 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

（課題番号:R02019）

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 2 年 7 月 1 日 ～ 令和 3 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) 宗像元康 吉田遼平	理工学府 理工学府	M1 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。

6．共同利用研究計画

規則正しい結晶構造をもつ安定な構造でありながら、マクロな弱い刺激に応答して目に見える物性が変化する物質群をソフトクリスタルと称する。「こする」などの機械的刺激に応答して発光特性が可逆的に変化するメカノクロミック発光（MCL）は、ソフトクリスタルが示す代表的な刺激応答特性である。申請代表者は、有機系ソフトクリスタルが、機械的刺激付与後に自発的に元の状態に戻る自己回復性MCLや、機械的刺激の強さに応答して二段階で発光色が変化する MCL を示すことを見出している。また、二成分を混合したソフトクリスタルが、機械的刺激付与時に高コントラストな発光色変化を示すことや、ON/OFF 型の発光スイッチング現象を示すことを見出している。本共同利用研究は、時間分解単一分子顕微分光装置を用いて、MCL性有機ソフトクリスタルの蛍光スペクトルや蛍光寿命を単一粒子レベルで観測することで、発光特性変化が生じる機構を明らかにすることを目的として実施する。得られた知見をもとに、将来的には、テラヘルツ分光法を用いた構造転移の解析などを行う予定である。

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）

2020 年 12 月 14 日(月)～15 日(火)にかけて、研究代表者および分担研究者の 3 名が受入研究者の研究室を訪問し、蛍光顕微鏡を用いて各種MCL性ソフトクリスタルの一粒子観測と蛍光寿命の測定を行った。また、2021 年 3 月には 3 種類の MCL 性ソフトクリスタル試料を送付し、受入研究者による一粒子観測と蛍光寿命の測定を 3 月 8 日(月)に行った。

8．共同利用研究の成果

令和 2 年度の共同利用研究では下記の成果を得た。

1. 機械的刺激に応答して結晶性固体と非晶質性固体の間で円偏光発光特性が変化するソフトクリスタルの蛍光顕微鏡観察により、非晶質性固体がウェーブガイド特性を有することを見出した。また、蛍光寿命測定により両者の発光がピレン環のモノマー発光とエキシマー発光に由来することを確認した。
2. 機械的刺激の強さに応じて二段階で発光色が変化する二成分系ソフトクリスタルの蛍光顕微鏡観察により、三状態が明確にことなる蛍光色と蛍光寿命を示すことを明らかとした。
3. 機械的刺激と加熱刺激に段階的に応答して発光波長が短波長化する各種ソフトクリスタルについて、各状態の蛍光寿命を測定し、輻射/無輻射速度が蛍光量子収率に与える影響について知見を得た。
4. 発光特性が異なる 3 種類の多形・擬多形結晶を形成する MCL 性ソフトクリスタルについて、蛍光顕微鏡観察と蛍光寿命の測定を行い、蛍光量子収率と輻射/無輻射速度定数の関係を明らかとした。

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。）

共同利用研究成果について、現在 3 報の論文を投稿中であり、1 件の学会発表を予定している。

1) Ito, S.; Sekine, R.; Munakata, M.; Asami, M.; Tachikawa, T.; Kaji, D.; Mishima, K.; Imai, Y. “Mechanochromic luminescence and solid-state circularly polarized luminescence of a chiral diamine-linked bispyrene” *submitted*.
2) Ito, S.; Sekine, R.; Munakata, M.; Yamashita, M.; Tachikawa, T. “Mechanochromic Luminescence (MCL) of Purely Organic Two-Component Dyes: Wide-Range MCL over 300 nm and Two-Step MCL by Charge-Transfer Complexation” *submitted*.
3) Ito, S.; Nagai, S.; Ubukata, T.; Tachikawa, T. “Multi-color mechanochromic luminescence of three polymorphic crystals of a donor–acceptor-type benzothiadiazole derivative” *submitted*.
4) 宗像元康、関根涼平、立川貴士、伊藤傑、「ビス（ピレニルメチル）基を有するジアミン誘導体とアントラキノンからなる混合色素の二段階メカノクロミック発光」、第 18 回ホスト-ゲスト・超分子化学シンポジウム、2021 年 6 月 26～27 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。

1) 伊藤傑、第 33 回安藤博記念学術奨励賞、「電荷移動発光の精密制御に基づく機械刺激応答型有機発光材料の開発」、一般財団法人安藤研究所、2020 年 10 月 17 日
2) 伊藤傑、第 35 回若い世代の特別講演会講演証、「有機結晶の精密構造制御に基づく高機能性発光センシング材料の開発」、公益社団法人日本化学会、2021 年 3 月 22 日

様式3

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 3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　大阪大学大学院理学研究科附属先端強磁場科学研究センター
職　名　特任研究員
研究代表者名　岩﨑義己

下記のとおり令和2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

（課題番号:R 02020）

1. 共同利用研究課題名	フラストレート磁性体の高圧下電子スピン共鳴
2. 共同利用研究目的	フラストレート磁性体 $CdCr_2O_4$,$CuFeO_2$ における磁気励起に関する圧力効果を電子スピン共鳴法で調べる。
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日　～　令和 3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)	理学研究科附属先端強磁場科学研究センター	特任研究員	ESR実験、解析
(分担研究者) 萩原　政幸 鳴海　康雄 木村　尚次郎	理学研究科附属先端強磁場科学研究センター 同上 東北大学金属材料研究所強磁場超伝導材料研究センター	教授 准教授 准教授	研究総括 ESR実験、解析 ESR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学研究部門	氏　名	太田仁・大久保晋・赤木暢

※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

昨年度に主に $CuFeO_2$ の単結晶試料において測定を行ったので、本年度は $CdCr_2O_4$,$CuFeO_2$ の単結晶試料を中心において、神戸大の多重極限テラヘルツ ESR(ハイブリッド圧力セル)システムを用いて研究内容に記載した実験を行う。

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）

今回の新型コロナウイルスの感染拡大に伴い、当初計画の出張・実験を実施できなかった。

8. 共同利用研究の成果

今回の新型コロナウイルスの感染症の影響より、実験実施が行えなかったため、本課題の進捗および成果は得られなかった。

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。）

同上理由のため無し

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。

同上理由のため無し

様式3

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 3 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　大阪市立大学
職　　名　講師
研究代表者名　菜嶋　茂喜

下記のとおり令和 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02021)

1. 共同利用研究課題名	テラヘルツ分子科学に供する専用オプティックスの開発
2. 共同利用研究目的	テラヘルツ分子科学の研究における種々の光学測定の要求に応じた 専用のテラヘルツオプティクスを開発する.
3. 共同利用研究期間	令和 2 年 7 月 1 日　～　令和 3 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) 菜嶋　茂喜	大阪市立大学大学院 工学研究科	講師	研究総括
(分担研究者) 岡田　大河 日野　優太 姫野　拓真 井上　美香 山﨑　大吾	大阪市立大学大学院 工学研究科(以下, 5 名同様)	修士2年 修士2年 修士2年 修士1年 修士1年	実験 実験 実験 実験 実験

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:R02021）

6. 共同利用研究計画

本研究では、テヘルツ分子科学の研究において、テラヘルツ（THz）強磁場 ESR 測定などに代表される種々の測定での要求に応じられる専用の THz オプティクスを開発することを目的としている。

初年度では、神戸大学分子フォトサイエンス研究センターの装置、とりわけ、試料フォルダー等のオプティックスに関連する実物確認し、要求される事項とアプローチについて打ち合わせする。神戸大学分子フォトサイエンス研究センターの 3D プリンター（Form2）などでプロトタイプを作製し、当研究室の FDTD 電磁界計算や THz 分光によって光学的な評価を行う。

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）
新型コロナウィルス感染予防により、貴学での研究は実施できなかった。電子メールおよび研究会などでのオンラインディスカッションを行った。

8. 共同利用研究の成果

①新導入された光硬化性樹脂を用いた THz 波領域における透過フィルターの検討

神戸大学分子フォトサイエンス研究センターにある 3D プリンター（Form2）で新たに使用されることになった樹脂（Rigid Black に変更）と導電性塗料を用いて、金属メッシュを模倣した THz 波領域における透過フィルターの作成を検討した。

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。）

菜嶋　茂喜，”テラヘルツ準光学素子の作製”，第 28 回(2019 年度) 日本赤外線学会研究発表会，(2019 年 11 月，福井大)．（単名での口頭発表.発表の後半に最近の取り組みとして，3D プリンターを用いた話を紹介した．）

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。

特になし

様式3

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 3 年 4 月 6 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 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02022)

1. 共同利用研究課題名	レドックス型イオン結晶細孔内に生成する発光性混合原子価銀クラスターの解析
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の細孔内に生成する発光性の小核混合原子価銀クラスターの核数・価数や状態を計測する。
3. 共同利用研究期間	令和 2 年 7 月 1 日　～　令和 3 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	東京大学 大学院総合文化研究科	准教授	研究全般のとりまとめ
(分担研究者) 奥永 友貴 原口 直哉	東京大学 大学院総合文化研究科 同上	大学院生 同上	物質合成、測定と解析 同上

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。

（課題番号:R02022）

6．共同利用研究計画

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均質に生成・分布する発光性の小核混合原子価銀クラスター（Ag_n^{m+}）の核数(n)・価数(m)や状態を決定し、クラスターの生成機構を検討する。なお、ゼオライト細孔中で生成する Ag_n^{m+}について、その核数(n)・価数(m)と発光スペクトルの極大波長の関係（例えば核数の増加により red shift）がよく知られており、これらの既存の情報をもとに、スペクトルデータの解釈を行う。

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）

新型コロナウイルス流行による出張制限のため、受入研究者に測定試料を送付し、メールベースで定期的にディスカッションを行った。

8．共同利用研究の成果

レドックス活性なポリオキソタングステートを構成ブロックとして有し、そのタングステン種の一部が還元状態にあるイオン結晶 $Cs_3H_5[Cr_3O(OOCH)_6(4\text{-ethylpyridine})_3]_3[\alpha\text{-}P_2W^{V}_5W^{VI}_{13}O_{62}]\cdot 5H_2O$ を合成した。このイオン結晶はナノサイズの孤立細孔を有しており、所定濃度の硝酸銀水溶液に浸すと、W^{5+}から取り込まれた銀イオンへの電子移動がおこり、小核混合原子価銀クラスター（Ag_n^{m+}）が生成する。このイオン結晶を粉砕し、その粉末をカバーガラス上に散布し、405 nm の CW レーザーを用いて単一粒子発光スペクトル観測を行った。発光スペクトルの極大波長から、銀は主に 4 核クラスター（$[Ag_4]^{2+}$）として存在すると推定され、元素分析の結果とあわせてイオン結晶の組成を$[Ag^0_{1.5}Ag^I_{1.5}]H_{4.5}[Cr_3O(OOCH)6(4\text{-ethylpyridine})_3]_3[\alpha\text{-}P_2W^{V}_3W^{VI}_{15}O_{62}]\cdot 7H_2O$ と決定した。令和 2 年度に得られた成果をもとに、令和 3 年度は、細孔内における銀クラスター形成過程の観測より、初期から$[Ag_4]^{2+}$が生成してその量が増加するのか、あるいは、初期には 2 や 3 核など小さなクラスターが生成してそれが成長するのか、形成機構を決定する予定である。

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部提出してください。）

[1] Naoya Haraguchi（分担研究者）, Tomoki Okunaga（分担研究者）, Yuto Shimoyama, Naoki Ogiwara, Soichi Kikkawa, Seiji Yamazoe, Miki Inada, Takashi Tachikawa（受入研究者）, and Sayaka Uchida（研究代表者）, Formation of Mixed-Valence Luminescent Silver Clusters via Cation-Coupled Electron-Transfer in a Redox-Active Ionic Crystal Based on a Dawson-type Polyoxometalate with Closed Pores, *Eur. J. Inorg. Chem.*, in press. https://doi.org/10.1002/ejic.202100101
共同利用研究への謝辞記載あり、2021/3/4 に採択通知、front cover への採択決定

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] 基盤研究 B（2020/4/1-2023/3/31、18,070 千円）・レドックス型イオン結晶格子を利用した金属クラスターの創成と機能開拓・研究代表者：内田さやか、研究分担者：立川貴士

様式3

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 3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　静岡大学・グリーン科学技術研究所
職　　名　教授
研究代表者名　近藤 満

下記のとおり令和2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02023)

1. 共同利用研究課題名	歪んだ銅中心をもつケージ型金属錯体の機能発現			
2. 共同利用研究目的	四面体に歪んだ銅(II)イオンが組み込まれたケージ型錯体が示す選択的な小分子捕捉活性のメカニズムの解明を目的とする			
3. 共同利用研究期間	令和 2 年 7 月 1 日 ～ 令和 3 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) 近藤 満	静岡大学・グリーン科学技術研究所	教授	ケージ錯体の合成と構造決定、および小分子捕捉活性の評価	
(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	小堀 康博 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:R02023）

6. 共同利用研究計画

ケージ型錯体の合成と、単結晶 X 線構造解析による固体構造の決定、ならびに、小分子の捕捉活性の解明を静岡大学の近藤が行う。ケージ骨格内に捕捉された小分子と銅イオンとの相互作用を固体構造から見積もるとともに、ゲスト分子の有無に応じたケージ骨格の分光スペクトルの比較を行う。小分子に対する捕捉選択性と、捕捉に伴う発色の変化を溶液状態のマススペクトルに加え、固体状態と溶液状態における可視紫外分光スペクトル、赤外吸収スペクトルを比較して明らかにする。

続いて、ケージ骨格に組み込まれている銅イオンの電子状態を ESR スペクトルを用いて明らかにする。この測定は、本共同利用研究の申請者である近藤が神戸大学分子フォトサイエンス研究センターに出張し、小堀教授の指導のもとで、当該施設の X バンド時間分解電子スピン共鳴分光装置を用いて行う。ゲスト分子を持たないケージ型錯体と、ゲスト分子を捕捉したケージ型錯体の溶液について、液体窒素などを用いた低温における ESR スペクトルを測定し、銅イオンに存在する不対電子の ESR シグナルを観測する。銅(II)中心の g 値と A 値を解析することで、銅イオンの四面体構造への歪みを見積り、ゲスト分子の捕捉と、ゲスト分子の捕捉に誘起される銅イオンのジオメトリー、および d—d 遷移がシフトするメカニズムを明らかにする。

7. 共同利用研究の実施状況

神戸大学において、3 月 15 日に ESR スペクトル（X バンド時間分解電子スピン共鳴分光装置）を用いて、サンプル測定と測定結果について議論を行った。

8. 共同利用研究の成果

環状骨格をもつ銅(II)錯体と、金属−金属結合をもつ二核コバルト錯体の ESR スペクトルを測定した。単結晶 X 線構造解析の結果より、銅(II)錯体は固体状態において四面体に歪んだ構造を取っていることが示唆された。銅(II)イオンは通常、平面四配位か、歪んだ六配位、あるいは五配位中心を取り、四面体構造は取りにくい。単結晶 X 線解析では四面体中心への歪みが見られたが、この構造が固体状態のパッキングの効果がなくなっても維持されているのかどうか、あるいはより四面体に歪んでいるのかどうかを評価した。測定の結果 は四面体の銅(II)イオンに期待される小さい分裂シグナルは観測されず、この銅(II)錯体は溶液中においてもより強い四面体への歪みは起こすことなく、むしろ平面四配位に近くなっていることが示唆された。

また、最近見出した Co−Co 結合をもつ二核コバルト錯体において、そのバナジウムの価数をスペクトルで評価した。いずれも2価の場合と2価、3価の混合原子価の可能性が示唆された。前者であれば反磁性で ESR シグナルは観測されず、後者であれば不対電子1個に由来する ESR シグナルの観測が期待される。実際には、ESR シグナルは観測されなかったことから、この化合物のコバルト中心の価数はいずれも2価であることが示唆された。

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。）

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

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 3 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　広島大学・大学院先進理工系科学研究科
職　　名　教授
研究代表者名　西原　禎文

下記のとおり令和 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02024)

1. 共同利用研究課題名	テラヘルツ ESR を用いた低次元分子性磁性体の磁気構造解明に関する研究
2. 共同利用研究目的	X バンド ESR ではスペクトルの分離が不可能であった低次元磁性体 $Cu_2(CO_3)(ClO_4)_2(NH_3)_6$ の粉末試料のスペクトルをテラヘルツ ESR によって分離し、ソリトン－アンチソリトンの束縛状態であるブリーザー励起を明らかにする。
3. 共同利用研究期間	令和 2 年 7 月 1 日　～　令和 3 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) 西原禎文	45	男	広島大学大学院先進理工系科学研究科
(分担研究者) 藤林将	28	男	広島大学大学院先進理工系科学研究科
眞邉潤	25	男	広島大学大学院理学研究科
木村真貴	26	女	広島大学大学院理学研究科
伊藤みづき	25	女	広島大学大学院先進理工系科学研究科
吉田将	22	男	広島大学理学部
栗原英駿	22	男	広島大学理学部
石川大輔	22	男	広島大学理学部

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:R02024）

6. 共同利用研究計画

測定のための試料整形を行うため、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フォルダー等を実物確認、ならびに最適な温度、磁場ー周波数領域を打合せする。実験では信号強度、共鳴磁場、吸収強度を調整するため、室温から減圧ヘリウム温度 1.8K までの測定を行い、低温で周波数依存性を測定し、エネルギー依存性を測定する。以上から、低次元磁性体 $Cu_2(CO_3)(ClO_4)_2(NH_3)_6$ のソリトンーアンチソリトン束縛状態であるブリーザー励起を明らかにする。

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 covid-19 感染症の為に神戸大学に来学することはできなかったが，広島大学内で今後の当該共同研究の発展を目指して新しい試料の合成を行っていた。一方で，以前に送付した試料を用いて神戸大学内で測定を継続して頂いており，今後，ディスカッションを重ねて結論を導いていく予定である。

8. 共同利用研究の成果

当該研究では、ソリトンーアンチソリトン束縛状態であるブリーザー励起の磁場依存性が明らかにし、ソリトンーアンチソリトン束縛状態の磁場に対するロバストさを見積もることを目的とした。当該年度は，covid-19 完成賞の為に神戸大学に来学することができなかった為，広島大学内で新たな試料調整を行った。同時に神戸大学分子フォトサイエンス研究センターで以前に送付した試料の測定を継続して行って頂いており，今後，得られた結果について詳細に議論する予定である。

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部提出してください。）

1. 伊藤みづき，西原禎文“結晶中チャネル構造における有機アンモニウムイオン交換”日本化学会秋季事業第 10 回 CSJ 化学フェスタ 2020，優秀ポスター発表賞受賞
2. 眞邉潤，西原禎文“分子性結晶におけるイオン交換キャリアドーピング法の確立”第 25 回（2020 年度）応用物理学会中国四国支部学術講演会，発表奨励賞受賞

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。

【受賞】
1. 伊藤みづき，西原禎文“結晶中チャネル構造における有機アンモニウムイオン交換”日本化学会秋季事業第 10 回 CSJ 化学フェスタ 2020，優秀ポスター発表賞受賞
2. 眞邉潤，西原禎文“分子性結晶におけるイオン交換キャリアドーピング法の確立”第 25 回（2020 年度）応用物理学会中国四国支部学術講演会，発表奨励賞受賞
【大型研究プロジェクト】
① 西原禎文，戦略的創造研究推進事業（さきがけ）・科学技術振興機構（JST）・単独
「ペタビット時代を支える革新的分子ストレージング技術の確立」
期間：令和元年度～令和4年
② 西原禎文，研究成果展開事業（START）・科学技術振興機構（JST）・単独
「籠型分子を用いた超高密度不揮発性メモリおよび超低消費電力 AI チップの開発」
期間：令和2年度～令和4年
③ 西原禎文，ムーンショット型研究開発事業（ミレニアプログラム）・内閣府・代表
「宇宙に人類が進出するための「デジタル生物圏」構築に関する調査研究」
期間：令和2年度～令和3年度
④ 西原禎文，挑戦的研究（開拓）（日本学術振興会）・代表
「電場による分子キラリティの制御」
期間：令和2年度 ～ 令和4年度

様式3

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 3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　佐賀大学・農学部
職　　名　助教
研究代表者名　堀谷 正樹

下記のとおり令和2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02025)

1. 共同利用研究課題名	テラヘルツESR法による整数スピン系金属タンパク質の電子状態研究
2. 共同利用研究目的	信号観測が困難である整数スピン系金属タンパク質の反応中間体を観測が可能なテラヘルツ ESR 装置の開発・改良および、これまで長年不明であったヘム酵素のもつ反応特異性を解き明かす
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日 ～ 令和 3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	助教	研究総括、実験・解析
(分担研究者) 二宮 春菜	佐賀大学大学院・先進健康科学研究科	修士2年	試料調整、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:R02025）

6. 共同利用研究計画

①昨年度までの共同利用研究の成果により、より安定な tmc 化合物における反応中間体 Fe(IV)=O 種の信号検出に成功した。さらにこのシステムを利用して、本年度はより不安定でタンパク質活性中心の構造に近いヘム型モデル錯体における Fe(IV)=O 種の ESR 測定を行ったが、こちらは信号観測に至らなかった。この結果からより不安定なヘム型モデル錯体では、測定中における分光器の不安定さ（ベースラインのうねりなど）が信号検出を妨げていると考えられた。そこで、今年度はベースラインの安定化を目指したテラヘルツ ESR 装置を組み立て直し、整数スピン系金属タンパク質の代表である Fe（II）Mb において信号観測を目指す。

②また①が達成されれば、①よりさらにチャレンジングな HRP 反応休止状態の還元型 Fe(II)の ESR 信号観測を行う。これまで整数スピン S= 2 由来の ESR 信号は Mn(III)置換 Mb および天然型 Fe(II)Mb、Hb で観測されているのみであり、Mn(III)と Fe(II)の ESR 信号は同じ S = 2 であるにもかかわらず、全く異なるものであった。本年度はこの性質は Mb、Hb に特有なものか、もしくは Fe(II)ヘム酵素に特有であるかを解き明かすべく、HRP の Fe(II)信号の検出を目指す。

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）

7 月にメールと電話にてディスカッションを行った。そして、Zoom を用いて、テラヘルツ ESR 測定に必要な分光器プローブの開発方法・手順、試料セットの仕方、試料の種類などをオンラインでディスカッションを行い、実際の試料についてリモートでテスト測定を行った。

8 月にメールで試料のセットアップ方法をディスカッションし、リモートで測定を行った。

11 月に代表者と分担者が神戸大学へ訪問し、対面で実験を行った（計 3 日間）。

8. 共同利用研究の成果

昨年度までに開発したテラヘルツ ESR 装置では、安定なタンパク質反応中間体モデル錯体の信号観測は可能であったが、よりタンパク質反応中間体に近いモデル錯体やタンパク質では信号観測が難しいことが分かった。そこで、本年度は光路をすべて閉空間にし、試料もライトパイプの中に組み込んだ新しいテラヘルツ ESR システムを開発した。この新システムの感度を確かめるべく、まず半整数スピン系モデル錯体で信号観測のチェックを行ったところ、十分な S/N 比で ESR 信号が得られることが明らかになった。そこで、次にヘムタンパク質反応中間体モデル錯体について、新システムの分光器で測定を行ったところ、S/N 比の向上はあまり見られなかったが、ベースラインの安定度が向上した。今研究課題で観測したい ESR 信号は線幅が広い系である。そのため、今年度に開発した分光器のベースライン安定度向上は、今後の目的達成に大きく貢献できる成果である。来年度以降は、本システムを利用してタンパク質試料の測定を行いたい。

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。）

（国際シンポジウム、招待講演）

M. Horitani, H. Ninomiya, H. Takahashi, T. Okamoto, K. Nishikawa, S. Okubo, E. Omichi, and H. Ohta
Advanced High Field and THz ESR Spectroscopic Studies on Heme Proteins with Integer Spin System
The 8th International Workshop on Far-Infrared Technologies, on-line, March 2021

(国内会議、ポスター)

二宮春菜、西川佳那、藤井浩、岡本翔、高橋英幸、大久保晋、大道英二、太田仁、堀谷正樹
整数スピン系ヘムタンパク質研究に応用可能な先端テラヘルツ ESR 装置開発
電子スピンサイエンス学会 2020、オンライン、2020 年 11 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。

（優秀ポスター賞受賞）

二宮春菜、西川佳那、藤井浩、岡本翔、高橋英幸、大久保晋、大道英二、太田仁、堀谷正樹
整数スピン系ヘムタンパク質研究に応用可能な先端テラヘルツ ESR 装置開発
電子スピンサイエンス学会 2020

様式3

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 3 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　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　古部昭広

下記のとおり令和 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

（課題番号: R02026）

1. 共同利用研究課題名	金ナノ構造修飾半導体光触媒における光誘起電子移動と電荷トラップ機構の検討
2. 共同利用研究目的	神戸大学の時間分解テラヘルツ分光システムにより金ナノ構造修飾半導体光触媒薄膜資料における光誘起電荷生成・緩和過程の解明を行う。
3. 共同利用研究期間	令和 2 年 7 月 1 日　～　令和 3 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)	48	男	徳島大学・大学院社会産業理工学研究部
(分担研究者)			
柳谷 伸一郎	47	男	徳島大学・大学院社会産業理工学研究部
日口 聖規	24	男	徳島大学・大学院先端技術科学教育部光システム工学コース
真木 祐太朗	24	男	徳島大学・大学院先端技術科学教育部光システム工学コース

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。

（課題番号:R02026）

6. 共同利用研究計画

石英基板上に作製する金ナノ構造修飾半導体光触媒薄膜を神戸大学に持ち込み光ポンプ-テラヘルツプローブ分光装置で、可視光あるいは近赤外光ポンプ後に生成する伝導電子のテラヘルツ応答を評価する。
サンプル数は 5～10 程度、実験回数は3回の予定である。
サンプルは、基板上に、金ナノ粒子配列体、酸化チタン薄膜、金蒸着膜を順次積層した構造であり、可視から近赤外波長領域に広帯域吸収帯を示すことが特徴である。酸化チタンの膜厚に依存した光電変換特性を示すことがこれまでの徳島大での実験で示されており、その詳細な機構解明を検討する予定である。

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）

来学による研究実施を行った（R2.12.25）。

8. 共同利用研究の成果

金ナノ構造修飾半導体光触媒はこれまで困難であった近赤外波長領域の光エネルギーを電気エネルギーや化学エネルギーに変換する機能を発揮することが期待されている。既に半導体光触媒中に伝導電子が生成することが確かめられているが、電子の移動距離、移動度、トラッピング時間、再結合機構などはまだよく分かっておらず、本研究で新たな知見を得ることにより、光触媒特性を向上させる手がかりや新たな THz 波制御の応用展開への足がかりを得ることを期待した。
R1 年度の実験で、8 個の試料に対して、テラヘルツ透過光の波形測定をおこなった。フーリエ変換すると 0.5～7 THz のスペクトル領域で光触媒半導体材料の膜厚に依存したスペクトルが得られ、THz 帯の ND フィルターとしての応用可能性が示唆された。フェムト秒 400nm ポンプ－THz プローブ時間分解測定では信号値が小さい試料が多く系統的なデータ取得ができなかった。
R2 年度は R1 年度の成果を 9 月に学会発表し、12 月に来学による実験を行った。フェムト秒 800nm ポンプ－THz プローブ時間分解測定に成功し、3 試料に対して光触媒半導体材料の膜厚に依存した過渡 THz 信号が得られた。THz 強度変調を 10～100 ps の時間領域でパルス光制御できた。

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部提出してください。）

2020 年応用物理学会秋季講演会（オンライン）
11a-Z24-7 “金ナノ構造-酸化チタン積層膜の THz-TDS 評価”
○日口聖規，小出洋史，柳谷伸一郎 ，川上烈生，片山哲郎，古部昭広，太田薫，富永圭介
2020.9.11.

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

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 3 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　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 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02028)

1. 共同利用研究課題名	三次元的フラストレートを持つ希土類化合物の磁性研究			
2. 共同利用研究目的	希土類 R のサイトが正八面体をなす $R_6Pd_{13}X_4$ (X = Zn, Cd)と $R_6Mg_{23}Z$ (Z = C, Si, Ge)、及び正四面体をなす $RMgZn_2$ の磁化を、SQUID 磁束計を用いて測定し、三次元的なフラストレートが磁性に及ぼす効果を明らかにする。さらに、$R_6Pd_{13}X_4$ の SQUID-THz-ESR を行い、磁性を定量的に評価するために必須である R の結晶場準位を見積もる。			
3. 共同利用研究期間	令和 2 年 7 月 1 日　～　令和 3 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 大政和之 中村優介	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	
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

昨年度と一昨年度に注目した $R_6Pd_{13}X_4$（R = 希土類、X = Zn, Cd）と $R_6Mg_{23}Z$（Z = C, Si, Ge）という立方晶化合物の SQUID 磁束計を用いた磁気的性質の解明、及び磁化に由来しない非従来型の異常ホール効果（AHE）の系統的な検証を開始する。さらに、1 THz の光のエネルギーが約 48 K と、希土類化合物の磁性を支配する重要な要素である 4f 電子の結晶場準位幅（数十～数百 K）と同程度であることに着目し、これらの SQUID-THz-ESR を行って、磁性を定量的に解析するために必須である R の結晶場準位の見積りを行う。

R 原子に着目すると、$R_6Pd_{13}X_4$ と $R_6Mg_{23}Z$ の場合は正八面体の副格子を、$RMgZn_2$ の場合は正四面体の副格子を組んでいる。そのため、三次元的なフラストレートに起因する物性発現が期待され、実際に $R_6Pd_{13}X_4$ と $R_6Mg_{23}Z$ ではフラストレートによる特異な反強磁性秩序を見出している（項目 12 参照）。本研究では、種々の R, X, Z を持つ化合物の磁化測定を行って、フラストレートに由来する物性を探る。続いて SQUID-THz-ESR 行い、結晶場準位に対応する光共鳴を調べる。そして、見積もられた結晶場準位から磁化を計算し、SQUID 磁束計による磁化測定で得られた磁化を再現出来るかどうかを検証する。

7．共同利用研究の実施状況

研究代表者、もしくは研究分担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。また、その実験過程で極低温部門の櫻井敬博助教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

$R_6Pd_{13}X_4$ と、$R_6Mg_{23}Z$ の中で、本年度は、$Ce_6Pd_{13}Zn_4$, $Nd_6Pd_{13}Zn_4$, $Ce_6Mg_{23}Ge$ について多結晶試料を用いたホール抵抗の測定を行い、SQUID 磁束計による磁化測定の結果と合わせて AHE の検証を行った。

$Ce_6Pd_{13}Zn_4$（3.3 K と 1.3 K で反強磁性転移を示す）のホール抵抗の磁場依存性を、1.3 K～3.3 K と、1.3 K 以下の二つの温度範囲で測定したところ、前者の温度範囲では反強磁性－常磁性の相境界に対応する磁場でなだらかな肩が現れた一方、後者の温度範囲では相境界近傍の磁場で極大が現れた。前者の肩の出現は磁化に伴う従来型の異常ホール効果に起因するとしても説明されるが、後者の極大の出現はそれでは説明できず、AHE に起因する可能性が考えられる。また、$Ce_6Mg_{23}Ge$（1.6 K で反強磁性転移を示す）のホール抵抗の磁場依存性も、反強磁性転移温度以下で極大を示した。これらとは対照的に、$Nd_6Pd_{13}Zn_4$（13.8 K で反強磁性転移を示す）のホール抵抗の磁場依存性は、反強磁性転移温度以下でも AHE を思わせる異常を示さなかった。

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。）

<u>学会発表</u>

(1)「新しい立方晶化合物 $RMgZn_2$（R = 希土類）の低温物性」
　松岡英一、吉本多嘉仁、菅原仁、櫻井敬博、太田仁
　日本物理学会 2020 年秋季大会（2019 年 9 月　オンライン開催）

(2)「新しい直方晶化合物 $R_4Pt_9Al_{13}$ (R = Ce, Pr)の磁気的、電気的、および熱的特性」
　中村優介、松岡英一、菅原仁、櫻井敬博、太田仁
　日本物理学会 2020 年秋季大会（2019 年 9 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。

様式3

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 3年 4月 26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2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

（課題番号: R02029 ）

1. 共同利用研究課題名	光誘起酸化還元反応を触媒する新規フラビン結合タンパク質の開発
2. 共同利用研究目的	本研究は、フラビンモノヌクレオチド（FMN）を発色団として青色光センサードメインとして機能するLOVドメインを対象として、「光合成タンパク質」への機能転換を目指した。本来の光反応に必須のシステインをアラニンに置換した変異体「LOV(C/A)」は、発色団であるFMN の光励起により、外部の電子供与体から電子を受容する。その電子を適当な電子受容体に与える反応を触媒する可能性が示されている。 この共同研究では、フェロシアン化カリウムを還元剤とした LOV(C/A)の光還元反応に着目し、その反応機構の解明を目指した。
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日 ～ 令和 3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)	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

（課題番号: R02029 ）

6. 共同利用研究計画

昨年度までの共同研究による結果では、LOV(C/A)の時間分解分光計測によって FMN の励起三重項状態は検出されたが、その後に蓄積が期待されるセミキノン型は検出されなかった。このことは光還元反応の量子収率が低いことを示唆していた。本年度は、この推定に基づいた反応速度論に基づいた速度論的パラメータの決定を試みた。また、C/A 以外のアミノ酸変異導入により FMN の光還元反応効率の変化を調べ、高効率に光還元反応が進む LOV 変異体をスクリーニングすることを試みた。電子移動反応に関与するアミノ酸を探索しその変異体を網羅的に探索することで、フェロシアン化物イオンから FMN への電子移動が LOV(C/A)より高い量子収率で行われるものをスクリーニングすることで、「光合成タンパク質」の実現を目指した。

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）

令和 2 年度は利用者の所属機関で調べる実験が終了しなかったため小堀研で計測する状況に至らず、試料送付は行わなかった。また、神戸大学への来訪も叶わなかった。

本研究計画及び関連する研究についてのメールによるディスカッションは令和 2 年 5-6 月（3 通往復）と令和 2 年 12 月-令和 3 年 3 月（10 通往復）にかけて、本研究並びに関連する研究結果に関する意見交換を断続的におこなった。学術誌への投稿ならびにリバイスのため、デスカッションをメールおよびオンラインにより行い、タンパク質発現の操作も進めている。

8. 共同利用研究の成果

試料に照射する光量子数を制御できる測定系を構築し、その系を用いて LOV(C/A)の光還元反応を計測した。8 μM の LOV(C/A) に対してフェロシアン化カリウムを 1 mM の濃度で加え、5 分間定常光照射して反応を観測した。試料へ照射する光量の条件を変化させてセミキノン型への光還元反応を計測したところ、正味の量子効率が 3.1×10^{-3} と見積られた。励起三重項状態の形成の量子収率の値 0.88 （Swartz et al., *J. Biol Chem.* 2001）を利用して、FMN のセミキノン型形成が励起三重項状態を経由する仮定の下で、励起三重項状態からセミキノン型への形成の反応効率が 0.34%だと計算された。以前の時間分解紫外・可視分光計測の共同研究の結果から還元剤の有無によって励起三重項状態の形成に違いが観測されなかったが、還元反応への効率が極めて低く還元反応に至る成分の検出が不可能であったと考察された。

生成したセミキノン型が酸化型 FMN に戻る反応は、以前の共同研究の結果から酸素分子が電子受容体である可能性が示されていた。一方、フェロシアン化物イオンが酸化されて生成するフェリシアン化物イオンがセミキノン型 FMN の電子受容体として働くかどうかの検討はしていなかった。これを調べるために 1 mM フェリシアン化カリウムを加えて計測を行った結果、セミキノン型の再酸化反応の時定数には影響を及ぼさなかった。このことから、還元型 FMN はフェリシアン化物イオンに電子を供与しないことが示唆された。このことは、LOV 変異体がフェロシアン化物イオンから受容した電子を他の電子伝達体に供与できる可能性が高まったといえる。今後、還元剤や酸化剤の濃度、光量を様々な条件で測定することで、反応モデルの構築や反応速度論的解析をより確かなものに出来るだろう、と小堀教授から研究の方向性に対する示唆を受けた。

一方、当初の研究計画で予定していた LOV(C/A)以外の変異体については、新型コロナの緊急事態宣言のため研究が思うように進められず計測が出来なかった。大腸菌での発現用の変異プラスミドは作成済みであり、大量発現をおこなえば計測できる状況ではあった。

この研究に関連して、光誘起電荷移動反応を行うフラビン結合タンパク質であるクリプトクロムを対象として、光反応で形成されるラジカルの環境を時間分解電子スピン共鳴分光法で測定し、ラジカルに水分子の関与が推定された。こちらの研究は原著論文として投稿している。この計測は LOV(C/A)においてもラジカルの環境を検出する手法として参考となる。

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。）

現在学術誌への投稿中であり、査読結果に対するリバイスのための追加実験を進めている。

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

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 3 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　福井大学 遠赤外領域開発研究センター
職　　名　教授
研究代表者名　谷 正彦

下記のとおり令和 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号: R02030)

1. 共同利用研究課題名	ラセミ体／光学活性分子のテラヘルツ分光
2. 共同利用研究目的	同じ分子種のラセミ体(D 体とL 体の二量体分子)と光学活性分子結晶に対して広帯域テラヘルツ分光を実施するとともに、理論計算によるスペクトル解析から、分子間相互作用および分子結晶構造の違いによるテラヘルツスペクトルの本質を理解することを目的とする。
3. 共同利用研究期間	令和 2 年 7 月 1 日 ～ 令和 3 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) 谷 正彦	福井大学・遠赤外領域開発研究センター	教授	研究統括
(分担研究者) 富永 圭介	神戸大学・分子フォトサイエンス研究センター	教授	分子スペクトル解析
張 峰	神戸大学・分子フォトサイエンス研究センター	助手	分子スペクトル計算
北原 英明	福井大学・遠赤外領域開発研究センター	特命助教	テラヘルツ分光実験
古屋 岳	福井大学・遠赤外領域開発研究センター	助教	テラヘルツ非線形分光実験
小野義泰	福井大学・工学研究科物理工学専攻	M2	テラヘルツ非線形分光実験補助
中川弥	福井大学・工学研究科知識社会基礎工学専攻	M1	テラヘルツ分光実験補助
中村響	福井大学・工学部応用物理学科	B4	テラヘルツ分光実験補助
尾崎大季	福井大学・工学部応用物理学科	B4	テラヘルツ非線形分光実験補助

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

アミノ酸分子であるアラニンのラセミ体および D 体（または L 体）のテラヘルツ帯分子スペクトルの精密測定を行い、ラセミ体と光学活性体のスペクトルの違いを実験的に確認する。共同利用機器としては 20GHz 程度の低周波数から 10THz 程度までの広帯域スペクトルをするため富永研究室の空気プラズマを光源とするテラヘルツ時間領域分光装置を用いる。次いで、違いが顕著に表れている分子種に対して理論計算を行い、実験で得られたスペクトルと比較解析を行う。100GHz 以下の低周波数領域の分子スペクトルの測定には共同開発した、テーパー付き平行平板金属導波路を用いる。また分子間振動の非線形性について研究を行うために、Tilted Pulse Front 法で非線形光学結晶（LiNbO3）からピーク電界で数 100kV/cm レベルの高強度テラヘルツ波を発生できるシステムを構築する。

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）

今年度は新型コロナ感染症の影響を考慮して、分子フォトサイエンス研究センターへの訪問は行わず、試料等の送付、研究方法の提案を行い、アラニン分子スペクトルの測定および理論計算は張峰助手等にお願いした。打合せおよび議論は遠隔会議と電子メールで行った。Zoom によるオンラインディスカッションは 2 回、電子メールやり取りは 20 回以上。

8．共同利用研究の成果

L-alanine および DL-alanine の分子結晶粉末を温度 78K、周波数範囲 5～80 cm^{-1} (0.15 THz ～ 2.4 THz)において測定した。またそのスペクトルを理論計算し、この周波数領域に現れる赤外活性モードについて分析し、吸収強度は結晶の対称性と分子間の振動モードに加えて、エネルギー的には小さい分子内の伸縮振動と Libration(秤動)振動の寄与が強く表れることを明らかにした。

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。）

上記の成果が下記の学術誌に掲載された。

Feng Zhang, Keisuke Tominaga, Michitoshi Hayashi, and Masahiko Tani: “A Quantitative Interpretation for the Difference of Terahertz Spectra of DL- and L-Alanine: Origins of Infrared Intensities in Terahertz Spectroscopy,” The Journal of Physical Chemistry C, [Volume 番号、ページ数未定] (2021)
(Online publication Date: July 14, 2021) (doi: 10.1021/acs.jpcc.1c02854)

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

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 3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　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2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

（課題番号: R02031 ）

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 2年 7月 1日 ～ 令和 3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) 松井勇太	徳島大学大学院創成科学研究科	学生(M2)	試料準備、実験遂行	
三木克哲	徳島大学大学院創成科学研究科	学生(M1)	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。

（課題番号: R02031 ）

6. 共同利用研究計画

実験には、太田研究室で開発されてきた、高圧強磁場下の ESR 測定装置を用いる。本研究では、加圧によるバンドギャップの消長や、磁場下でランダウ準位形成による影響を見ることになるが、実験装置としては ESR 装置がそのまま使えると考えられる。本年度は研究の第1段階として以下を行いたい。

(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) 黒リンの電子状態は面内の異方性が強く、偏光子を用いて特定の結晶軸（c 軸）方向の光を検出する必要がある。このため、ワイヤグリッドなどを用いて偏光測定を行う方法を検討する。
(3) 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。

なお、新型コロナウィ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。試料は既に送付している。

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）

コロナ禍に伴う移動の制限により、神戸大へ来学しての打ち合わせ、ディスカッションを1回行うに留まった。実際に実験を行うには至らなかった。この打ち合わせにより、およそ以下のような実験を行う予定を立てた。

1. 黒リン単結晶試料を用いて、常圧から 3 GPa 程度の圧力において、サイクロトロン共鳴の実験を行う。
2. 黒リン結晶は面内異方性があるが、センターの高圧下 ESR 測定装置では、入射光を変更させるのは困難であるため、無偏光で測定を行う。
3. 黒リンは常圧でバンドギャップが 0.3 eV の半導体であるが、外部圧力の印加と共にギャップが減少し、およそ 1.5 GPa でギャップが閉じて金属化する。この金属化の前後で、トポロジカル状態の出現が予想されるなど、興味深い電子状態が期待される。このため、1 GPa から 2 GPa までの圧力範囲で、特に詳しく測定を行う。

なお、試料はすでに分子フォトサイエンスセンターへ送付済みであり、センター側の体制が整えば、上記の計画に従って実験を行いたいと考えている。

8. 共同利用研究の成果

未だ実験を行えていないため、成果は出ていない。

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。）

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。

様式3

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 3年 4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　京都大学大学院理学研究科
職　　名　教授
研究代表者名　渡邊一也

下記のとおり令和2年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02032)

1. 共同利用研究課題名	非晶質有機半導体の超高速テラヘルツ応答に関する研究				
2. 共同利用研究目的	ルブレンやテトラフェニルジベンゾペリフラテンなどの非晶質有機薄膜およびその電子受容性分子との界面について、電子励起に伴う電荷分離状態の生成減衰ダイナミクスを紫外励起―テラヘルツプローブ計測により明らかにする				
3. 共同利用研究期間	令和 2年 7月 1日 ～ 令和 3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) 渡邊一也	京都大学大学院理学研究科		教授	研究全般	
(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

本共同利用機関で現有の 400 nm ポンプ・テラヘルツプローブ計測システムを利用し、当該有機薄膜の応答を調べる。有機薄膜の作成は申請者の研究室で真空蒸着法により行い、当該分子の非晶質薄膜およびそれらとC60 等の電子受容体とのヘテロ界面を構築した試料を用意し、紫外励起―テラヘルツプローブ測定により界面での光誘起電荷分離ダイナミクスを観測する。申請者のグループではすでにこれらの有機薄膜について、紫外・可視域の過渡吸収分光および発光分光により、一重項励起子分裂や励起子拡散に関する基礎データを取得している。これらの知見と本共同研究によるテラヘルツ領域の情報を合わせ、当該薄膜における電子励起状態ダイナミクスの解明を目指す。加えて、上記有機薄膜を銀薄膜で挟んだ共振器構造を作製し、共振器中のポラリトン形成に伴う電荷移動過程の変調をテラヘルツプローブにより行う。

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）

今年度は、下記に述べる試料作製、可視域の定常・時間分解測定による評価を行うことで手一杯であり、テラヘルツ計測の段階まで進まなかった。引き続き次年度への継続をお認め頂き、今年度得られた成果に基づきテラヘルツ計測による電荷分離速度の変調を実証したいと考えている。

8. 共同利用研究の成果

真空蒸着法により、テトラフェニルジベンゾペリフラテン（DBP）と C60 を交互積層した薄膜を銀薄膜で挟んだ微小共振器を作製し、定常反射率測定により、ポラリトン形成について評価を行った。共振器長を調整することで、DBP の励起子に共振器定在波光子が共鳴する条件を実現し、DBP の励起子と光子が結合したポラリトンによる吸収帯を確認した。次に、この下枝ポラリトンに共鳴した励起光を用いて、交互積層膜共振器の可視域プローブによるポンプ－プローブ測定を行った。ポラリトンの褪色信号と、励起状態吸収が観測され、その減衰挙動は銀鏡で挟んだ試料と挟まない試料とで明確な違いを示し、光誘起電荷分離過程が微小共振器中で変調を受けていることを示唆する結果が得られた。定常反射率スペクトルの理論解析により抽出したポラリトンのエネルギー準位および平衡核配置のずれを用いて、観測された電荷移動速度の変化をフェルミ黄金律に基づいて説明することを試みた。

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。）

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

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 3 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　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 2 年度の共同利用研究成果を報告します。

記

(課題番号:R02033)

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 2 年 7 月 1 日　～　令和 3 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) 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 笈田　智輝 光藤　誠太郎 浅野　貴行 大久保　晋 太田　仁 船越　風太 恒石　一義 仲　恭平 原　茂生	福井大学遠赤外領域開発研究センター 福井大学学術研究院工学系部門物理工学講座 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 福井大学学術研究院工学系部門物理工学講座 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 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 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 大学院生 教授 准教授 准教授 教授 大学院生 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。 実験の補助。 解析補助。 試料作成補助。 装置作成、改良。 装置改良、及び解析補助。 実験の補助。 実験の補助。 実験の補助。 試料作成及び評価。

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	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）

福井大学にて測定した Henmilite の X-band ESR について2度のオンラインディスカッションを行い、得られた結果より *g*-tensor の妥当性等について確認した。また、過去に神戸大学で測定を行った Henmilite のデータについても合わせて議論を行った。得られた *g*-tensor について現在論文投稿の準備を進めている。

また、$ACo_2(SeO_3)\cdot 3(H_2O)$ (A=Sr,Ba)は新規に試料合成を行い結晶構造や磁化率等の基礎物性評価を福井大にて実施した。この試料は六法晶系に属しており、2 つの面共有 CoO_6 が c 軸方向に向いたユニットを組み、ab 面内でハニカム構造を形成することから2次元磁性体としてフラストレート効果などの発現が期待される。

8. 共同利用研究の成果

現在 Henmilite においては、X-band ESR や D-band ESR を実施し *g*-tensor を決定した。論文投稿準備を進めている。

神戸大から新たに着任した原氏により、共同研究の一環として光を用いた新規単結晶試料合成法の開発を行った。新たに合成した $ACo_2(SeO_3)\cdot 3(H_2O)$ (A=Sr,Ba)については、光（GHz 帯電磁波）を照射しながら合成を行う光水熱合成法を用いた最初の物質である。単結晶育成においては結晶核を中心に放射状に成長するため異方性測定などに不向きである。良質な単結晶試料を得るため一軸性の光の場の中で結晶成長させる試みとして光を照射しながら溶液中で結晶育成を行い、結晶成長に一定の改善効果が見られることを確認した。

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。）

〈Henmilite〉

該当無し。

〈$ACo_2(SeO_3)\cdot 3(H_2O)$ (A=Sr,Ba)〉

・日本物理学会第 76 回年次大会（PSC-36）.

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。