

大阪大学大学院 理学研究科 化学専攻  
アニュアルレポート  
2020

# 目 次

はじめに	1
<b>I. 化学専攻における研究活動</b>	
1. 分析化学研究室	3
2. 放射化学研究室	4
3. 無機化学研究室	5
4. 錯体化学研究室	6
5. 物性物理化学研究室	7
6. 表面化学研究室	8
7. 量子化学研究室	9
8. 反応物理化学研究室	10
9. 生物物理化学研究室	11
10. 構造有機化学研究室	12
11. 物性有機化学研究室	13
12. 天然物有機化学研究室	14
13. 有機生物化学研究室	15
14. 生体分子化学研究室	16
15. 生物無機化学研究室	17
16. 構造熱科学研究センター	18
17. 資料先端研究室 (総合学術博物館)	19
18. 同位体化学研究室	20
19. 粒子ビーム化学研究室	21
<b>II. 業績リスト</b>	
1. 原著論文	23
2. 総説	41
3. 出版物	43
4. その他	44

## はじめに

大阪大学大学院理学研究科  
化学専攻長 梶原 康宏

理学研究科化学専攻は昭和6年(1931年)大阪大学創設とともに、理学部化学科として5研究室で発足しました。その後発展して、昭和34年に高分子学科を新設し、昭和54年には化学熱学実験施設(現在の熱・エントロピー科学研究センター)を設立しました。現在は、無機化学分野6研究室(学際化学講座および全学教育推進機構の各1研究室を含む)、物理化学分野7研究室(構造熱科学研究センター、総合学術博物館の各1研究室を含む)、有機化学分野5研究室(学際化学講座の1研究室を含む)、さらに産業科学研究所および蛋白質研究所に属する8研究グループ、大阪大学放射線科学基盤機構2研究グループ(同位体化学研究室、粒子ビーム研究室)、および併任・連携講座の5研究グループによって構成されています。これらの研究室群は現代化学の多様な研究分野をカバーしており、基礎化学に根ざした学部・大学院教育を担うとともに、大学でしか出来ない幅広い最先端の学術研究を展開しています。この小冊子は、これらの研究室のうち、大学院理学研究科化学専攻基幹講座および豊中キャンパスにおける協力講座に属する19研究室(上記の各分野)の最近の研究・教育活動と業績を紹介するものです。産業化学研究所や蛋白質研究所などに属する協力講座につきましては、各研究所の報告書などをご覧ください。

理学研究科附属基礎理学プロジェクトセンターは、理学研究科J棟(教育研究交流棟)において大規模プロジェクト型研究の拠点となっており、産学連携、放射線管理などの業務を行っております。

また理学研究科では、部局横断型のグローバルリーダー育成教育プログラムである博士課程教育リーディングプログラム「超域イノベーション博士課程プログラム」および「インタラクティブ物質科学・カデットプログラム」、さらに卓越大学院プログラム「先導的量子ビーム応用卓越大学院プログラム」に参画して、研究教育を実施しております。そして令和2年度より大阪大学の「博士課程教育リーディングプログラム」の成果を引き継いで、理学研究科を含む理工情報系の10部局などが一体となって運営する博士課程プログラムである「大阪大学理工情報系オーナー大学院プログラム」が開始され、このプログラムにも積極的に取り組んでいます。

人事面では、表面化学研究室に教授1名、生体分子化学研究室、放射化学研究室にそれぞれ准教授1名が新たに加われました。また、放射化学研究室、物性有機化学研究室から教授各1名が定年退職致しました。

令和2年度は、コロナ禍での活動となり、多くの講義がオンラインになりました。また、研究室も感染拡大を避けるために一時完全閉鎖となり、その後も活動の制限が続きました。しかし、そのような環境下でも化学専攻の教員、学生は研究を辛抱強く続け、本冊子に専攻の1年間の研究・教育活動の業績をまとめることができました。ご一読いただき、ご意見などをいただければ幸いです。

## I. 化学専攻における研究活動

# 分析化学研究室

塚原 聡 (教授)、諏訪 雅頼 (助教)、山本 茂樹 (助教)

## <主な研究テーマ>

新たな原理に基づいた分析法を開発し、分析化学の新領域を開拓すべく研究を行っている。光学的手法を駆使し、溶液中の物質を『拡大して見る』ことで、その化学的性質や構造・機能を明らかにする研究を行っている。生体や環境中において、多くの物質は nm から  $\mu\text{m}$  サイズの微粒子や集合体を形成して機能している。その分離分析手法の開発を行っている。高分子の高次構造を解析できる新たな分析法を確立するために、ラマン光学活性および低波数振動分光について研究を行っている。

- (1) 水中に作製した  $\mu\text{m}$  サイズの有機液滴の誘電泳動挙動の *in situ* 顕微測定
- (2) 交流磁場中における磁気ナノ粒子の回転挙動観測
- (3) ラマン光学活性および低波数振動分光によるポリマー高次構造の解析

## <研究活動概要>

(1) 密度が  $1.0 \text{ g cm}^{-3}$  よりわずかに高いアセトフェノンまたは 2-フルオロトルエンの  $\mu\text{m}$  サイズの液滴を、重水-軽水混合溶媒中に分散させ、不均一な交流電場を印加して、その有機液滴の誘電泳動挙動を倒立型の光学顕微鏡で測定した。その結果、有機液滴/水界面には、高い界面伝導率の存在が示された。これは、なんらかのイオンが選択的に界面に吸着していることを示唆しており、新しい界面の評価法として期待できるものである。

(2) 交流磁場に対する磁気ナノ粒子 (Magnetic Nanoparticle; MNP) の磁化ダイナミクスを利用する医療技術が発展しつつある。これらの技術では、MNP 内での磁化の回転 (内部回転) と粒子自体の回転 (物体回転) を考慮する必要がある。先の研究で、MNP 分散液の光学異方性から物体回転が観測できることを実証した。この測定法の高感度化を行い、球状マグネタイト MNP の物体回転を調査した。幾つかの数値計算で予想されていた通り、粒径や磁場の振幅による回転モードの変化を観測した (図 1) [1]。

(3) ラマン光学活性 (Raman Optical Activity; ROA) は振動準位において分子キラリティを測定する分光法であり、その立体配座への鋭敏さから、新たな構造解析法として期待されている。我々は高感度 ROA 装置の開発、キラル高分子試料の測定、および高分子の量子力学スペクトル計算について研究を行っている。さらに、これまで帰属さえ行われていなかった  $800 \text{ cm}^{-1}$  以下の低波数振動 ROA 実験を行い、キラル高次構造の高感度検出の可能性を示した。

## <参考文献>

1. Suwa, M.; Uotani, A.; Tsukahara, S., Magnetic and viscous modes for physical rotation of magnetic nanoparticles in liquid under oscillating magnetic field. *Appl. Phys. Lett.* **2020**, *116*, 262403.

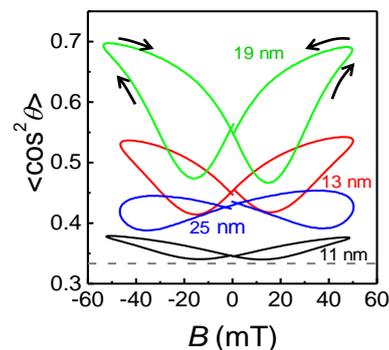


図 1 振動磁場下 (44kHz) での液中酸化鉄磁気ナノ粒子の配向ヒステリシスカーブ。  $\theta$  は磁場と磁気容易軸の角度。回転モードの粒径依存性を観測した。

# 放射化学研究室

篠原 厚 (教授)、笠松 良崇 (講師)、二宮 和彦 (助教)

## <主な研究テーマ>

本研究室では「新しい原子の創造—エキゾチックアトムと超重元素の化学」を旗印に、以下の研究を進めています。

- (1) 重元素の化学的・核的性質に関する研究
- (2) エキゾチックアトムの形成過程とその化学的挙動
- (3) 核医学用放射性核種の研究開発
- (4) 環境放射能の放射化学的研究
- (5) その他：新規核壊変特性（半減期の化学効果など）、中高エネルギー中性子核反応と宇宙化学など、広く放射化学に関連するテーマ

## <研究活動概要>

(1) 104 番元素 Rf の固液抽出やシュウ酸トリウム共沈実験の基礎実験として、同族元素 Zr や Hf、Th の放射性核種を用いて化学分離を行った。また、102 番元素 No の硫酸沈殿実験を行うための基礎実験を 2 族元素を用いて行った。これら基礎実験から、重元素の錯形成の様子を調べるための条件を決定している。また、量子化学計算により、これらの実験系における同族元素の電子状態や溶存化学種の推定を行い、重元素の研究が実現することで明らかにできる化学的性質について考察を進めている。

(2) J-PARC (茨城県東海村) および PSI (スイス) におけるミュオン化学研究を展開した。特にミュオンの特性を生かしたユニークな非破壊分析法の開発を進め、J-PARC においては微量な隕石試料に対する非破壊分析の基礎研究を実施した。PSI においては、鉄の化合物をミュオンにより区別し、化学状態を調べる新たな分析法開発を実施した。

(3) 医-理-核物の連携によるアルファ線核医学治療法開発プロジェクトの RI 製造グループでは、引き続き理研や QST との連携による  $^{211}\text{At}$  の定常的供給、および  $^{225}\text{Ac}$  の供給を行った。新規薬剤開発では多くの共同研究が立ち上がり、甲状腺がん治療を目指した  $^{211}\text{At}[\text{NaAt}]$  の治験の準備も進められた。また、At の化学的性質に関する研究では、電解合成法による新しい At の標識法開発がスタートした。

(4) 福島原発事故により環境中に放出された放射性同位元素について、今なお存在している長半減期核種  $^{137}\text{Cs}$ 、 $^{90}\text{Sr}$ 、 $^{239}\text{Pu}$ 、 $^{240}\text{Pu}$  に注目して、その環境動態や放射性 Cs を濃集した粒子の分析を行った。原発周辺で採取した土壌試料中の  $^{90}\text{Sr}$  分析を系統的に行うことで、その環境分布を明らかにして事故時の放出過程を調べた。さらに土壌中での移行過程を調べ、 $^{90}\text{Sr}$  は  $^{137}\text{Cs}$  よりも土壌深部への移行が早いことを明らかにした。

(5) 放射光照射による  $^{229\text{m}}\text{Th}$  の励起実験を進めている。化学状態による核の脱励起過程の変化を観測するために新たに  $^{229}\text{ThF}_4$  沈殿試料の作製に取り組んだ。

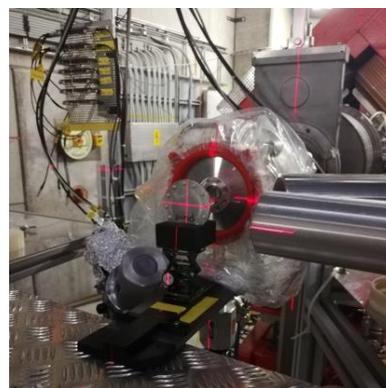


図. PSI でのミュオン化学実験

## <参考文献>

1. Kasamatsu Y. et al., *Nature Chem.* **2021**, *13*, 226-230.
2. Ninomiya K. et al., *J. Radioanal. Nucl. Chem.* **2020**, *324*, 403-408.

# 無機化学研究室

石川 直人 (教授)、福田 貴光 (准教授)、Anas Santria (助教)

## <主な研究テーマ>

- (1) 不完全充填 f, d,  $\pi$  電子系を有する系の電子構造と磁性の基礎研究
- (2) 極端に大きな磁気異方性や磁気緩和時間を有する金属錯体の電子構造と磁性
- (3) 複数の磁性サイトを有する系の磁気緩和メカニズムの基礎研究
- (4) 配位子場の化学的・物理的操作による磁気異方性・分子磁性の制御

## <研究活動概要>

化学において、4f ブロック錯体群の磁性に対する関心は低かった。その理由の一つとして一般に 4f 電子が配位子場の影響をほとんど受けないと見なされていたことが挙げられる。しかし、実際には基底多重項は配位子場によって数百  $\text{cm}^{-1}$  程度分裂し、低温下で錯体それぞれに特徴的な磁性が現れる。我々は、2003 年に世界で初めて希土類錯体の「単分子磁石」挙動を報告し、それ以来、4f ブロック分子磁性研究分野は大きな発展を見せている。本研究室では 4f 電子が関与する新しい研究分野を開拓することを大きな目標として活動を行っている。

我々は、最近、4f 電子系と、光励起された環状  $\pi$  共役系との新たな磁氣的相互作用の存在を発見した。フタロシアニン二層型 Tb 錯体、Dy 錯体は「単分子磁石」挙動を示すが、これらの化合物の配位子は環状  $\pi$  電子系を持ち、可視領域にある二重縮重  $\pi$ - $\pi^*$  励起状態において、分子面に垂直な軌道角運動量  $\mathbf{L}$  を持つ。すなわち、励起状態において、起源の異なる  $\mathbf{J}$  角運動量と  $\mathbf{L}$  角運動量を同時に持つ特異な系となる。

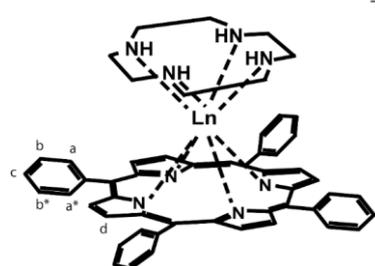


図1 [Ln(TPP)(cyclen)]Clの構造

本年度は、引き続き環状  $\pi$  電子系を有するもう一つの代表的な化合物である、ポルフィリンの希土類錯体における  $\mathbf{J}$ - $\mathbf{L}$  相互作用について研究を行い、新しい成果が得られた。高い対称性を有し、かつできるだけ単純な構造を持つ、一方の配位子を  $\pi$  電子を持たないサイクレン配位子に置き換えた錯体 (図1 [Ln(TPP)(cyclen)]Cl; Ln = Tb, Dy) について、温度・磁場依存 MCD スペクトル測定を行った。ポルフィリンが有する可視領域の 2 つの  $\pi$ - $\pi^*$  電子遷移 (Q 帯、B 帯) において、著しい温度依存性と非線形な磁場依存性が観測され、 $\mathbf{J}$ - $\mathbf{L}$  相互作用がこの錯体でも存在されることが確認された。独自の理論モデルに基づき、 $\mathbf{J}$ - $\mathbf{L}$  相互作用項の定量に成功した。さらに、ab-initio RASSCF/RASSI 法による量子化学計算を行い、励起状態における  $\mathbf{J}$ - $\mathbf{L}$  相互作用に関する量子化学的研究を初めて報告した。

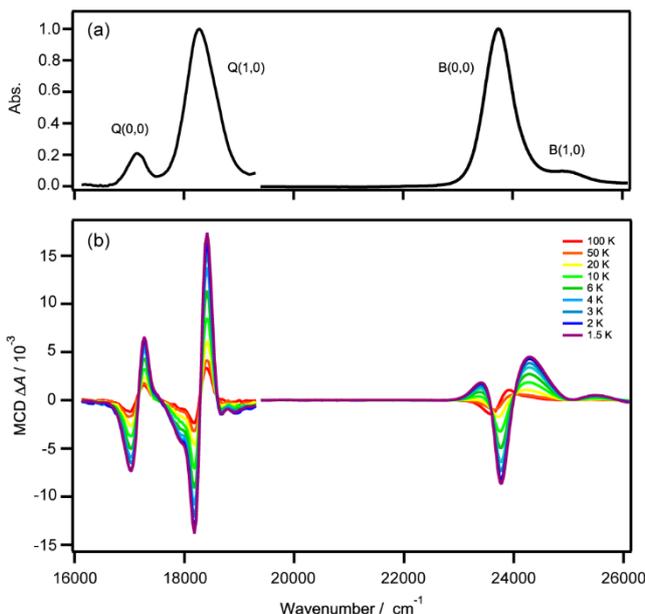


図2 [Tb(TPP)(cyclen)]ClのMCDスペクトルの温度依存性

## 錯体化学研究室

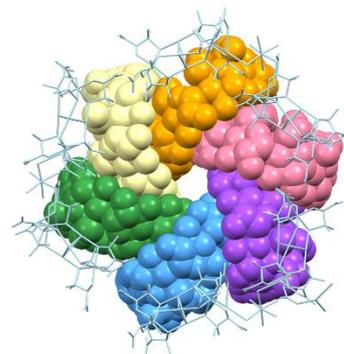
今野 巧 (教授)、吉成 信人 (准教授)、桑村 直人 (助教)、小島 達弘 (助教)

### <主な研究テーマ>

- (1) 錯体配位子法による非クーロン力支配型イオン性固体 (NCIS) の創製
- (2) チオラト錯体の段階的集積化による金属超分子構造の構築に関する研究
- (3) 金属錯体のキラル認識とキラル選択的集積化による分子集合体の構築
- (4) 硫黄架橋多核錯体の構造制御と物性に関する研究

### <研究活動概要>

(1) L-システイン (L-H<sub>2</sub>cys) をもつアニオン性 Rh<sup>III</sup><sub>4</sub>Zn<sup>II</sup><sub>4</sub> 八核錯体のカリウム塩 (K<sub>6</sub>[Rh<sub>4</sub>Zn<sub>4</sub>O(L-cys)<sub>12</sub>]) の結晶を、酢酸ランタノイド (Ln(OAc)<sub>3</sub>) の水-エタノール混合溶液に浸すと、単結晶性を保持したまま、ランタノイドキュバングラスタール ({Ln<sub>4</sub>(OH)<sub>4</sub>}<sup>8+</sup>) をもつ単結晶に変換されることが分かった。さらに、Gd(OAc)<sub>3</sub> の溶液に浸した結晶については、{Gd<sub>4</sub>(OH)<sub>4</sub>}<sup>8+</sup> キュバンに由来する磁気冷凍挙動を初めて見出した。



(2) D-ペニシラミン (D-H<sub>2</sub>pen) をもつアニオン性 Au<sup>I</sup><sub>3</sub>Co<sup>III</sup><sub>2</sub> 五核錯体 ([Au<sub>3</sub>Co<sub>2</sub>(D-pen)<sub>6</sub>]<sup>3-</sup>) を酢酸ナトリウム緩衝液中で結晶化すると、五核錯体錯体が {Na<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>15</sub>}<sup>4+</sup> により連結された 78% の空隙率をもつ三次元フレームワークを形成することが分かった。さらに、この結晶をγ-シクロデキストリン (γ-CD) の水溶液に浸すと、二次元フレームワークをもつ結晶へと変換され、その結晶内にはγ-CD の六量体を取り込まれることが分かった。L-pen をもつ Au<sup>I</sup><sub>3</sub>Co<sup>III</sup><sub>2</sub> 五核錯体を用いた場合には、同様の単結晶変換は起こらず、結晶中へのγ-CD の取り込みも見られなかった。

(3) ビス(ジフェニルホスフィノ)メタン (dppm) と DL-H<sub>2</sub>pen または DL-H<sub>2</sub>cys を混合配位した金(I)二核錯体 ([Au<sub>2</sub>(dppm)(DL-cys)<sub>2</sub>]<sup>2-</sup> と [Au<sub>2</sub>(dppm)(DL-pen)<sub>2</sub>]<sup>2-</sup>) の 1:1 混合物にニッケル(II)イオンを反応させると、10種類の Au<sup>I</sup><sub>2</sub>Ni<sup>II</sup> 三核錯体 ([Au<sub>2</sub>Ni(dppm)(DL-cys/DL-pen)<sub>2</sub>]) が生成することが分かった。さらに、反応溶媒を変えると、配位子のキラリティー、ニッケル(II)中心のキラリティー、および配位子の種類の異なる Au<sup>I</sup><sub>2</sub>Ni<sup>II</sup> 三核錯体が分別結晶化されることを見出した。

(4) Pt<sup>II</sup><sub>2</sub>Pd<sup>II</sup><sub>2</sub> 環状四核錯体 ([Pd<sub>2</sub>{Pt(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(D-pen)<sub>2</sub>}]<sub>2</sub>) に塩化マンガン(II)を反応させると、四核錯体がマンガン(II)二核ユニット ({Mn<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>}<sup>2+</sup>) により連結された二次元シート状錯体が形成された。一方、臭化マンガン(II)との反応では、{Mn<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>}<sup>4+</sup> により連結された三次元ネットワーク構造をもつ錯体が得られた。この三次元ネットワーク錯体は、優れた水素発生触媒能を示すことを見出した。

### <参考文献>

1. Yoshinari, N.; Meundaeng, N.; Tabe, H.; Yamada, Y.; Yamashita, S.; Nakazawa, Y.; Konno, T. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 18048-18053.
2. Somsri, S.; Kuwamura, N.; Kojima, T.; Yoshinari, N.; Konno, T. *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 9246-9253.

# 物性物理化学研究室

中澤 康浩 (教授)、坪 広樹 (准教授)、山下 智史 (助教)

## <主な研究テーマ>

- (1)  $\pi$ 電子の強相関機構に誘引された結晶格子のガラス状態の形成
- (2) 分子性物質の新奇スピン状態の探索と物性解明
- (3) 金属錯体、分子性電荷移動塩の新奇な熱電効果の解明
- (4) 分子性化合物における巨大な電荷分離構造と其中で生じる非平衡物性
- (5) 極性分子の固体内での配向制御と輸送特性に関する研究

## <研究活動概要>

(1) 強相関分子性化合物で特徴的に起こる電荷自由度のガラス化過程は、高速に制御できる電子系相転移を起源とする新しいガラス形成機構として興味もたれる。 $\theta$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>X (X=I<sub>3</sub>, RbZn(SCN)<sub>4</sub>, CsZn(SCN)<sub>4</sub>)はバンドフィリングが1/4である非ダイマー性分子性電荷移動塩であり、電子の強い相関効果と三角格子構造によるフラストレート性によって、電荷揺らぎ、電荷凍結現象が現れ、電荷ガラスを形成する系である。一連の $\theta$ 型塩において、電荷分布が秩序化した電荷秩序絶縁体となる塩、電荷がガラス凍結した塩、伝導性、超伝導性を示す塩について図1の様な装置で、単結晶熱容量、熱伝導率の測定を行った。電荷の乱れが光学フォノンと音響フォノンの混成を生じさせ、X線等では綺麗な規則性のある結晶状態を保ったまま、配向ガラス等に特徴的な大きな低エネルギー励起を生じさせていることを明らかにした。また、カウンターイオン層にS=3/2のスピンをもつCo<sup>2+</sup>を導入した物質の熱力学量の磁気応答性について追跡し、電荷ガラス状態の形成に伴い非磁性のsinglet型になっていたスピン自由度が、磁場の印加によって磁気一次転移を伴いながらCo<sup>2+</sup>のスピンと $\pi$ -d相互作用を通して結合する現象を新たに見出した。

(2) 二量体性をもつ分子性電荷移動塩の中で、 $\kappa$ 型の構造を示すスピン液体物質の基底状態に関する研究を進めた。反強磁性絶縁相からスピン液体相に変化すると、電荷ギャップのあった状態から、有限の $\gamma$ をもつスピン液体に1次転移的に変化する。一方、金属状態とスピン液体状態の間の変化は、それと比べて緩やかな変化となる。さらに、スピン液体にドーピングをして、電荷の閉じ込めを抑制した状態では非Fermi液体的な性質が出現することが判った。スピン液体と隣接する電子相との関係について総合的に議論した。

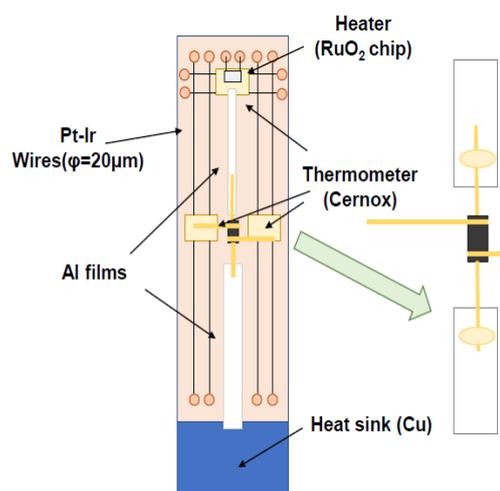


図1. 微小単結晶を用いた磁場下熱伝導度測定システム

## <参考文献>

1. Yesil E. et al., *J. Phys. Soc. Jpn.*, **2020**, *89*, 073701, 1-5.
2. Yoshimoto R. et al. *Sci. Rep.* **2021**, *11*, 1332, 1-10.

# 表面化学研究室

赤井 恵 (教授)、加藤 浩之 (准教授)、山田 剛司 (助教)

## <主な研究テーマ>

- (1) 有機薄膜の光電子分光、顕微観測、および発光分光
- (2) 機能性自己組織化二分子膜の作製と評価

## <研究活動概要>

近年、有機デバイスの実用化・高性能化に向けて、電極/有機薄膜界面の電子状態を基に、導電物性や光学特性を解明することの重要性が再認識されている。2020年度は主に、分子と固体表面が接する界面の電子状態と分子配列の関係を解明するとともに、分子機能の発現について研究を進めた。

研究テーマ(1)に関し、典型的な有機半導体であるペリレンについて、薄膜の構造と光物性に関する研究を行った。グラファイト基板にペリレン単分子膜を作製し、超構造を走査トンネル顕微鏡 (STM) で観察した。低温 (80 K) では分子は2量体を形成し、基板に対し分子長軸を立てて吸着することが判明した。この単分子膜を紫外光で励起すると、橙色 (~610 nm) の蛍光放出が見られ、励起2量体 (エキシマ) からの発光に由来することが分かった。なお、室温付近では2量体構造は見られず、単分子由来の緑色の蛍光が観察された。吸着構造の温度依存性を微視的視点から捉えることにより、蛍光放出特性との相関が明らかになった。

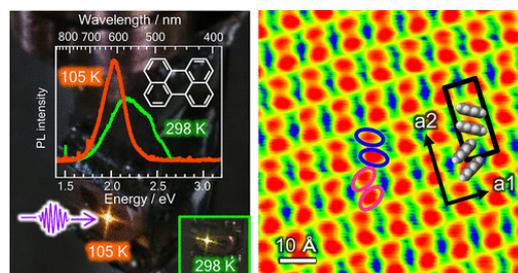


図1. (左)ペリレン単分子膜からの発光と(右)STM像(80 K) [1]

研究テーマ(2)では、独自に開発した自己組織化異種二分子膜における電子-プロトン相関物性の研究を進めた。当二分子膜はプロトン ( $H^+$ ) ドナーとアクセプターを水素結合で結んだ二分子膜で、ドナー分子には電子-プロトン相関物性の発現で注目されている Cat-TTF 系分子、アクセプター分子にはイミダゾールで修飾したアルカンチオール単分子膜からなっている。二分子膜の構造は良好で、類似系の実験から自己組織化的に得られる最安定構造であることが確認された。また、プロトン移動に関して、理論グループとの共同研究から、数  $V/nm$  の電界刺激でプロトン移動が誘起されることが示され、十分なポテンシャルを有していることが確認された (図2) [2]。

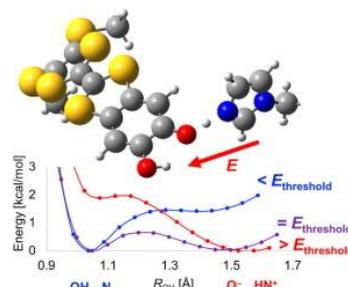


図2. 異種二分子膜における2分子間プロトン移動ポテンシャルの評価 [2]

## <参考文献>

1. Yamada, T.; Araragi, K.; Kato, H. S.; Munakata, T. *J. Phys. Chem. C* **2020**, *124*, 12485-12491.
2. Kanematsu, Y.; Kato, H. S.; Yoshimoto, S.; Ueda, A.; Yamamoto, S.; Mori, H.; Yoshinobu, J.; Matsuda, I.; Tachikawa, M. *Chem. Phys. Lett.* **2020**, *741*, 137091, 1-4.

# 量子化学研究室

奥村 光隆 (教授)、山中 秀介 (准教授)、川上 貴資 (助教)

## <主な研究テーマ>

- (1) 貴金属超微粒子触媒を中心とした反応量子化学
- (2) 磁性、伝導性、光物性に関する物性量子化学
- (3) 量子化学基礎理論

工業触媒として用いられている Au@NiO 触媒の構造安定性と、この触媒によるメタクリル酸メチル合成反応の反応機構を、第一原理計算によって検討した。その結果、内殻の金クラスターと NiO 表面薄膜の層間から表面への電荷移動がおり、NiO 薄膜中の Ni 欠損を安定化するとともに、表面吸着酸素分子を活性化することが明らかとなった。そして Ni 欠損直上の格子酸素原子が塩基点として作用するとともに、その近傍に吸着活性化された酸素分子を用いてへミアセタールからメタクリル酸メチルの触媒反応が容易に進行することを明確化した。

Au-Ni の二種の金属から形成されるナノ粒子上でジクロロエタン中で水素分子を活性化し、ベンジルアルコールの OH 基の水素化分解反応が進行するという実験結果に対して、ジクロロエタンをこのナノ粒子が分解することにより塩素イオンを生成させ、それを元に塩化水素を合成し、それらを用いた触媒反応が進行することと、カルボカチオン中間体の存在を第一原理計算から明らかにした。また、これらの反応を進行させるためには、Au と Ni の接合界面が重要であることも発見した。

その他に、高精度計算を用いて Mn クラスターの電子状態の解析を実行するとともに、有機ラジカル分子の磁氣的相互作用を周期境界条件を用いた結晶構造において先験的に算出する理論式を提案した。

## <参考文献>

1. Hayashi, A.; Tada, K.; Koga, H.; Kawakami, T.; Yamanaka, S.; Okumura, M., *J. Phys. Chem. C*, **2020**, 124, 17039-17047.
2. Ato, Y.; Hayashi, A.; Sonoura, A.; Koga, H.; Ishida, T.; Tokunaga, M.; Okumura, M., *Chem. Phys. Lett.*, **2020**, 754, 137773.

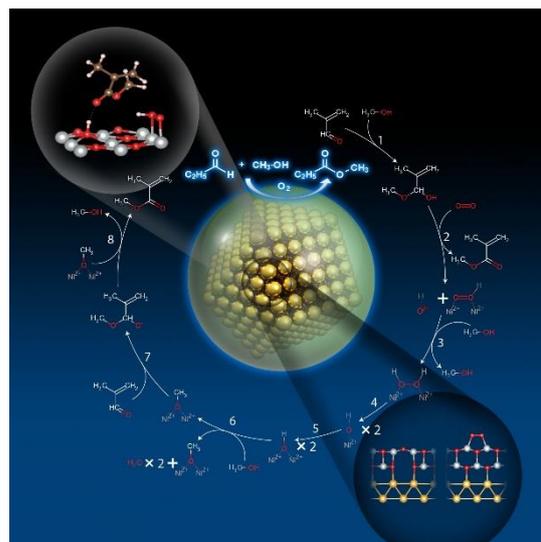


図1 Au@NiO 触媒によるメタクリル酸メチル合成反応の全反応機構と活性点構造

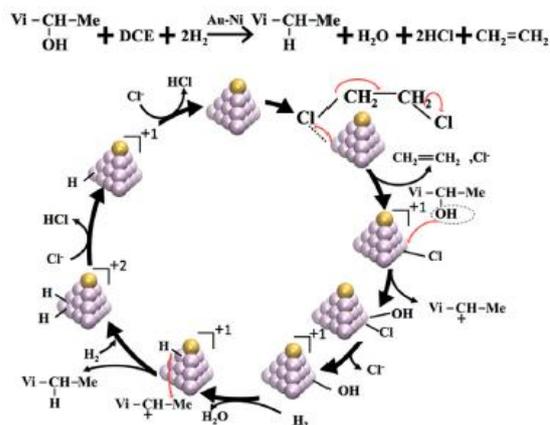


図2 Au-Ni 合金クラスター上で進行するジクロロエタン分解による HCl 合成を経由したアルコールの水素化分解反応機構

# 反応物理化学研究室

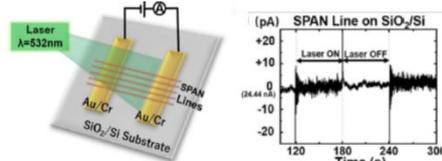
松本卓也 (教授)、大山 浩 (准教授)、 蔡 徳七 (講師)、大塚 洋一 (助教)

## <主な研究テーマ>

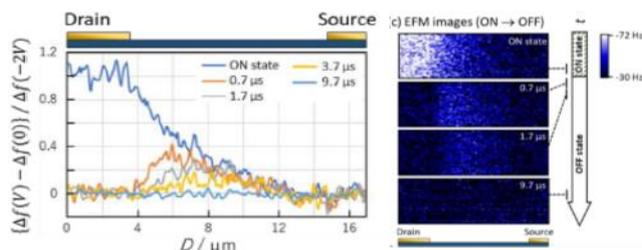
- (1) 電子移動反応に基づく分子エレクトロニクスの構築
- (2) 時間分解静電気力顕微鏡の開発
- (3) 走査型プローブエレクトロスプレーイオン化法の開発
- (4) 気-液界面の衝突立体ダイナミクスの液サイズ-形状依存性
- (5) 気相分子のレーザー分光および反応制御

## <研究概要報告>

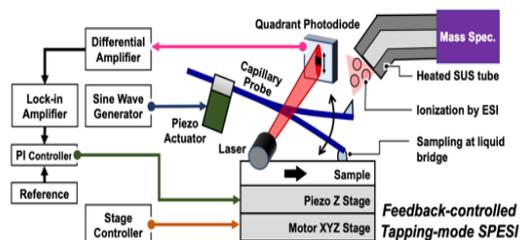
- (1) ポリアニリン分子細線を利用して、神経型ネットワークによる情報処理で重要な微小な独立ノイズの発生に成功した。
- (2) 時間分解静電気力顕微鏡を開発し、ポリアニリン薄膜中の電荷の動きをマイクロ秒より高い分解能で動画観測し、画像からキャリア密度と移動度を見積もることに成功した。
- (3) 走査型プローブエレクトロスプレーイオン化法 (SPESI) のフィードバック制御システムを開発し、ヒト心疾患組織中の局在性脂質の可視化に成功した。
- (4) イオン液体のケージ崩壊に誘起された新規ガス溶解機構の発見と、その気-液界面立体ダイナミクス研究と液サイズ-形状依存性への展開を開始した。
- (5) ハロタン分子の配向状態を規定した光解離実験から、競争的に生成する Br 原子と Cl 原子の生成メカニズムを解明した。



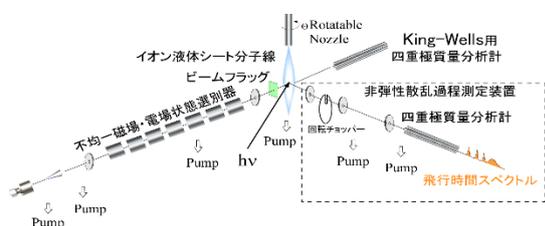
ポリアニリン分子細線によるノイズ発生



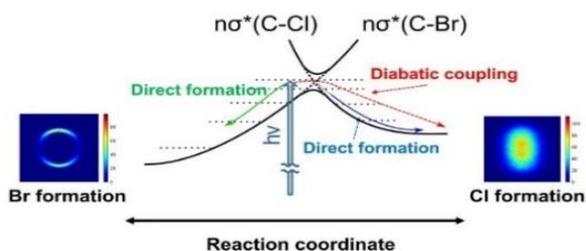
ポリアニリン上電荷の時間分解画像化



SPESI の帰還制御システムの開発



気-液界面立体ダイナミクス研究装置の開発



光解離による Br と Cl 原子の競争的生成メカニズム

## <参考文献>

1. Kajimoto, K.; Araki, K.; Usami, Y.; Ohoyama, H.; Matsumoto, T. *J. Phys. Chem. A* **2020**, *124*, 5063–5070.
2. Teramoto, T. ; Ohoyama, H. *J. Phys. Chem. B* **2020**, *124*, 8331–8339.

# 生物物理化学研究室

水谷 泰久 (教授)、石川 春人 (講師)、水野 操 (助教)

## <主な研究テーマ>

- (1) タンパク質の機能発現メカニズムの解明
- (2) 連動性を利用した人工タンパク質の開発
- (3) 柔らかな分子の機能の科学
- (4) 時間分解分光学の開拓

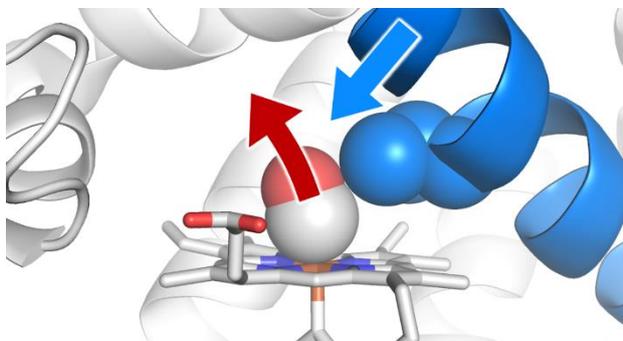
## <研究活動概要>

### (1) 光駆動イオン輸送タンパク質の機能発現機構

光駆動ナトリウムイオン輸送タンパク質 *Krokinobacter rhodopsin 2* (KR2) は、光エネルギーを利用してナトリウムイオンを能動輸送するタンパク質である。私たちは、共鳴ラマンスペクトルを基にして、KR2 の発色団と近接したアミノ酸残基との水素結合様式の特異性を明らかにした。近接したアミノ酸残基について 19 種の変異体タンパク質試料を作製し、スペクトルを比較した結果、水素結合様式の特異性はタンパク質の多量体構造と相関していることがわかった。このことは、四次構造変化がイオン輸送機構に関与していることを示している。

### (2) タンパク質立体構造の機能的稠密性

タンパク質の立体構造は、高い原子充填率を持つことが知られている。私たちは、ガス分子のタンパク質からの脱離過程を時間分共鳴ラマン分光法によって観測した。結合部位からガス分子が脱離した後、数ピコ秒の時定数で $\alpha$ ヘリックスの配向変化が観測された。その振幅は、ガス分子と接するアミノ酸側鎖の大きさに依存した。このことは、ガス分子とアミノ酸側鎖との立体反発の解消がヘリックスの動きを駆動することを示しており、機能を生む構造変化に、原子間接触が重要な役割を果たすことを意味している。



### (3) タンパク質内エネルギー移動機構の解明

エネルギーはすべての変化の源であり、分子内および分子間でのエネルギー移動機構の解明は分子ダイナミクスを理解を導く。私たちは、 $\alpha$ ヘリックスの周期的構造を利用して、タンパク質内エネルギー移動の距離依存性を定量的に調べた。過渡的なエネルギー分布は、熱拡散モデルから得られた分布とよく一致した。この結果は、タンパク質内のエネルギー移動が原子間接触を主な経路とした拡散的な性質をもつことを示している。

## <参考文献>

1. Otomo, A.; Mizuno, M.; Inoue, K.; Kandori, H.; Mizutani, Y. *Biochemistry* **2020**, *59*, 520–529.
2. Tahara, S.; Mizuno, M.; Mizutani, Y. *J. Phys. Chem. B* **2020**, *124*, 5407–5414.

# 構造有機化学研究室

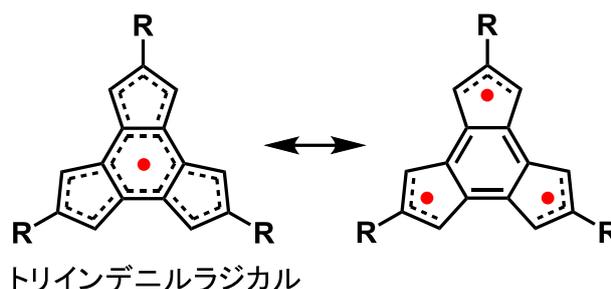
久保孝史（教授）、平尾泰一（講師）、西内智彦（助教）

## <主な研究テーマ>

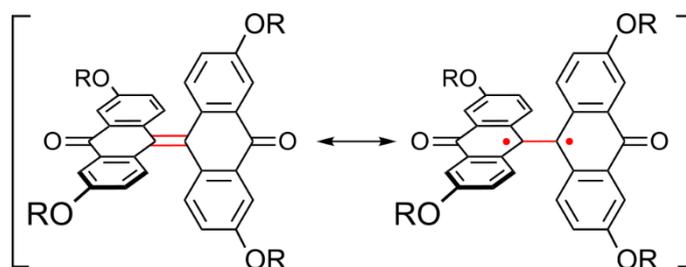
- (1) 二重項トリラジカル性の発現を目指したトリインデニルラジカルの合成
- (2) ねじれた炭素-炭素二重結合に由来したビラジカル性の解明
- (3) 芳香環を密接させた環状 $\pi$ クラスターの合成と外部刺激応答性評価

## <研究活動概要>

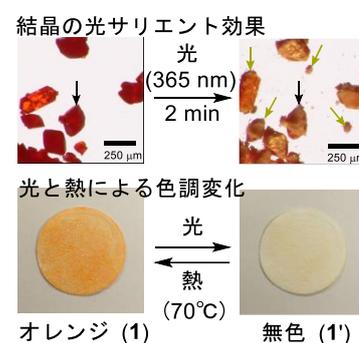
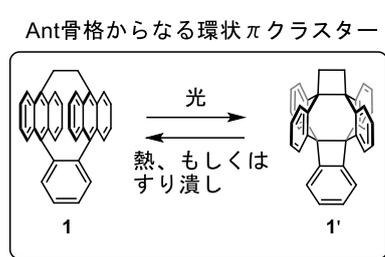
(1) トリラジカル性の発現が期待できる炭化水素モノラジカル種の合成を試みた。置換基 R が *tert*-ブチル基のトリアニオン種を発生させ、電子酸化を行ったところ、中性ラジカル種の発生には至らなかったが、三回対称性のモノラジカルジアニオン種の検出に成功した。



(2) ねじれた構造をもつビアントロン誘導体を結晶として単離した。単結晶 X 線結晶構造解析から二つのアントラセン環を繋ぐ炭素-炭素二重結合が結合長 1.43 Å、二面角 57.3°で大きくねじれ構造が観測された。熱励起三重項状態に由来する微細構造をもつ ESR スペクトルが明確に観測されたことから、ねじれた二重結合がビラジカロイドとして振る舞うことが実験的に明らかになった<sup>[1]</sup>。



(3) 広い $\pi$ 平面を有する二つのアントラセン(Ant)を最短で 2.8Å の距離まで密接させた環状 $\pi$ クラスター分子 **1** を合成した。この分子は Ant が一枚の時とは全く異なる赤色を示し、光照射による[4+4]異性化で大きくひずんだ無色の光異性化物 **1'** を与えた。この光照射を赤色の結晶に対して行うと、結晶が飛び跳ねながら異性化が進行する珍しい光サリエント効果を示し、またこの光異性化物は、70°C程度の熱もしくは物理的に擦るだけで逆反応が進行し赤色に戻るといふ、様々な外部刺激に応答する分子であることを明らかにした<sup>[2]</sup>。



## <参考文献>

1. Hamamoto, Y.; Hirao, Y.; Kubo, T. *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, *12*, 4729–4734 (Front cover).
2. Nishiuchi, T.; Kisaka, K.; Kubo, T. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 5400–5406.

# 物性有機化学研究室

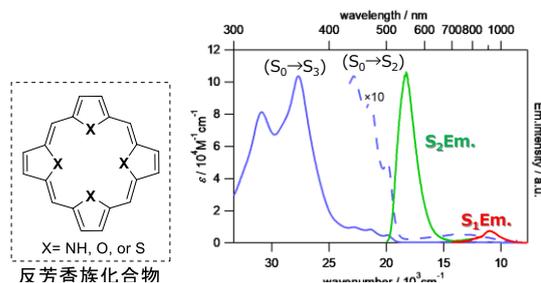
小川 琢治 (教授)、山下 健一 (講師)、谷 洋介 (助教)

## <主な研究テーマ>

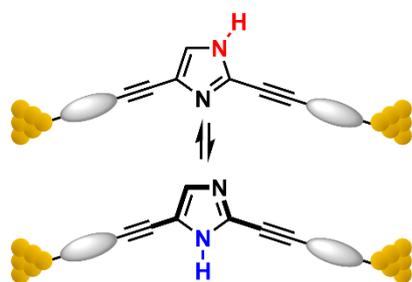
- 1) 反芳香族化合物の系統的発光特性評価と希土類様発光色素の創製への展開。
- 2) ポルフィリノイドおよび金属錯体の機能化学。
- 3) 単分子エレクトロニクス素子の開発。
- 4) 高効率りん光を示す有機分子材料の開発。

## <研究活動概要>

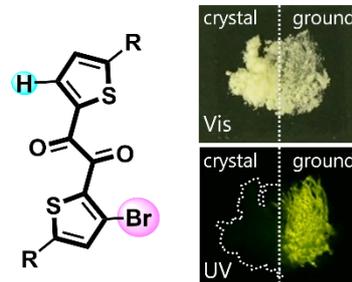
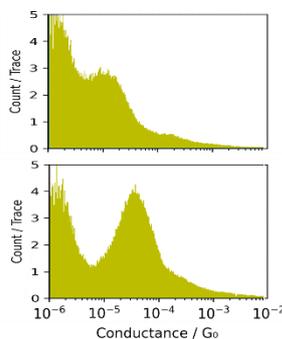
(1) 一般的な有機化合物は、Kasha 則に則り最低励起状態からの発光のみが通常紫外～可視光領域に観測される。我々は、単一の有機分子で希土類錯体に匹敵するような多様な発光特性を実現することを目指している。実現のための鍵化合物として反芳香族化合物に注目し、系統的な誘導体ライブラリの構築が可能な反芳香族ポルフィリノイドを用いて、系統的な発光特性の評価を行い、通常有機化合物とは全く異質な発光色素の創製を行っている。これまでに、図に示したイソフロリンが、多重発光、および近赤外発光を示すことを明らかにした。



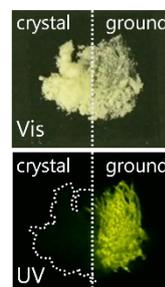
- (2) 種々のポルフィリン金属錯体の対面型二量体を示すゲスト包接挙動、芳香族性、運動性などの評価を行った。
- (3) イミダゾールからなる単分子素子を系統的に合成し、その単分子電気伝導特性を計測・評価した。イミダゾールの互変異性に由来する2つの電気伝導が観測され、ナノ電極間における互変異性化反応を溶液中などと比較・評価した。
- (4) 機械刺激によってりん光機能を獲得する有機分子を見出した。この分子は、以前に開発したりん光メカノクロミズムを示す  $C_2$  対称分子を非対称化することによって得られた。詳細な結晶構造解析から、分子構造の非対称化と結晶中の分子運動、および発光特性の関連を明らかにすることに成功した。



Proton Transfer



Turn-on Phosphorescence



## <参考文献>

1. Yamashita, K.; Nakajima, K.; Honda, Y.; Ogawa, T. *Chem. – Eur. J.* **2020**, *26*, 3633–3640.
2. Tani Y.; Komura M.; Ogawa T. *Chem. Commun.* **2020**, *56*, 6810–6813.

## 天然物有機化学研究室

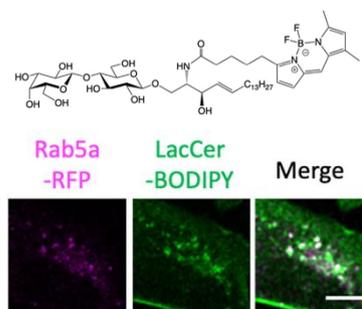
深瀬 浩一 (教授)、樺山 一哉 (准教授)、下山 敦史 (助教)、真鍋 良幸 (助教)

### <主な研究テーマ>

- (1) 糖鎖の合成とケミカルバイオロジー研究
- (2) 微生物ならびに動物由来の免疫調節分子の機能研究
- (3) マイクロフロー合成を基盤とする反応集積化
- (4) 蛍光標識化合物のライブセルイメージング
- (5) 合成糖鎖で修飾された細胞膜分子の動態解析
- (6) 効率的がんワクチン療法の開発
- (7)  $\alpha$ 線核医学治療

### <研究活動概要>

我々は、糖脂質や糖タンパク質などの複合糖質における糖鎖機能解析のため、糖鎖合成とバイオイメージングなどの生細胞機能解析技術を組み合わせた糖鎖機能研究を展開している。糖脂質の代謝に焦点を当て、蛍光標識した糖脂質を生細胞に導入し、糖脂質の組成と局在の変化を解析した<sup>1)</sup>。蛍光標識ラクトシルセラミド (LacCer-BODIPY) を培養細胞に導入して、共焦点顕微鏡を用いたバイオイメージングを行った結果、蛍光標識糖脂質プローブは、細胞膜から細胞内小器官であるエンドソームやゴルジ体へと移動した後、再び細胞膜に戻ることが確認された。また糖脂質プローブが主にトランスゴルジネットワーク (TGN) を介してリサイクルされていることを明らかにした。



グラム陰性菌のリポ多糖は、自然免疫受容体 TLR4/MD-2 複合体に作用して、免疫増強作用を示す。我々は、活性中心リピド A のアシル基の鎖長、数、結合位置によって、免疫増強作用や炎症性を制御できることを見出している。パイエル板の樹状細胞内に生息する共生細菌 *Alcaligenes faecalis* 由来のリピド A は特徴的なアシル化パターンを有しており、温和な免疫増強作用を有すること、特に粘膜ワクチンの効力を高める効果的なアジュバントとして有望であることを見出した<sup>2)</sup>。

がんワクチン治療は、温和で高いがん選択性を示す治療法として期待されている。乳がんワクチン候補として、HER2 由来がん抗原ペプチド CH401 に脂質を導入し、それを親油性アジュバントである Pam<sub>3</sub>CSK<sub>4</sub>、 $\alpha$ -GalCer、大腸菌リピド A と、それぞれ共集合させた自己アジュバント化ワクチンを合成した。マウスモデルにおいて CH401 と  $\alpha$ -GalCer の共集合体は CH401 に対する抗体を効率的に誘導した<sup>3)</sup>。

### <参考文献>

1. Arai, K.; Kanie, Y.; Kanie, O.; Fukase, K.; Kabayama, K. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **2020**, *532*, 19-24.
2. Yoshii, K.; Hosomi, K.; Shimoyama, A.; Wang, Y.; Yamaura, H.; Nagatake, T.; Suzuki, H.; Lan, H.; Kiyono, H.; Fukase, K.; Kunisawa, J. *Microorganisms* **2020**, *8*, 1102.
3. Aiga, T.; Manabe, Y.; Ito, K.; Chang, T.C.; Kabayama, K.; Ohshima, S.; Kametani, Y.; Miura, A.; Furukawa, H.; Inaba, H.; Matsuura, K.; Fukase, K. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2020**, *59*, 17705-17711.

# 有機生物化学研究室

梶原 康宏 (教授)、岡本 亮 (講師)、真木 勇太 (助教)

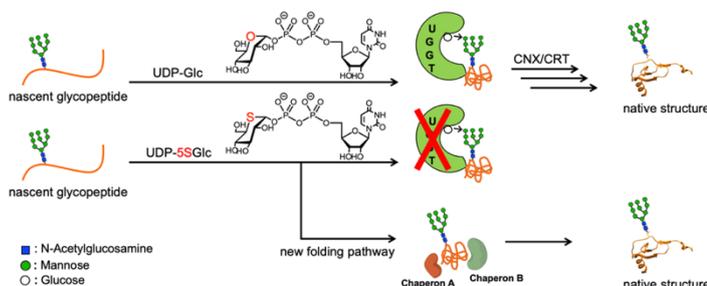
## <主な研究テーマ>

- (1) 糖タンパク質の化学合成
- (2) 糖鎖の合成
- (3) 糖鎖の生合成・分解の分子機構の解明

## <研究活動概要>

小胞体(ER)内では、ミスフォールド糖タンパク質のリフォールディング過程を監視する、品質管理機構が働いている。この機構は、カルネキシン/カルレティキュリン(CNX/CRT)サイクルとも呼ばれている。9つのマンノース残基を持つ糖鎖(M9糖鎖)を有する糖タンパク質がER内で合成されると、フォールディングセンサー酵素であるUGGTによって、タンパク質部分が正しい立体構造をもっているか特異的に評価される。ミスフォールド状態と判断された場合、UGGTはUDP-Glucoseを基質としてM9糖鎖に対してグルコース(G)1残基を転移し、G1M9糖鎖が合成される。ER内では、G1M9糖鎖をもつミスフォールド糖タンパク質は、シャペロンタンパク質であるCNX/CRTによって天然型構造へとリフォールディングされる。これにより、正しくフォールディングしたG1M9型糖タンパク質は、Glucosidase-IIによりグルコース1残基が除去され、CNX/CRTサイクルから離脱する。CNX/CRTサイクルは糖タンパク質のフォールディングに大きな役割を果たすが、UGGTによるグルコース転移が必要不可欠かどうかは厳密には明らかになっていない。そこで本研究では、UDP-5S-Glucoseを用いた小胞体画分溶液中における糖タンパク質のフォールディング過程の解析を行った。

まず、M9糖鎖をもつケモカインMCP-1のポリペプチドを化学合成し、これとUDP-Glucoseを、ラットの肝臓より単離した小胞体画分溶液に加えた。高速液体クロマトグラフィー質量分析によりフォールディング過程を追跡した結果、本条件では効率よくフォールディングが完了することを見出した。一方、阻害剤としてUDP-5S-Glucoseを反応液に加えたところ、糖タンパク質のフォールディングが効率よく阻害された。この結果より、糖タンパク質のフォールディングは、主としてCNX/CRTサイクルが管理していることが示唆された。一方で、UGGTの基質であるUDP-Glucoseを加えずに、MCP-1ポリペプチドのフォールディングを同様に追跡した。その結果、UDP-Glucoseが欠乏した条件下でも、糖タンパク質は効率よくフォールディングすることがわかった。これについては、UDP-Glucose非存在下でも、UGGTのM9糖鎖およびミスフォールド部位の認識を経て、リフォールディングが起こったと解釈している。以上の結果から、糖タンパク質のリフォールディングにはUGGTを利用するCNX/CRTサイクルが主として機能していることが示唆された。



## <参考文献>

1. Maki, Y.; Okamoto, R.; Izumi, M.; Kajihara, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 20671-20679.
2. Hossain, M. A.; Okamoto, R.; Karas, J. A.; Praveen, P.; Liu, M.; Forbes, B. E.; Wade, J. D.; Kajihara, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 1164-1169.

# 生体分子化学研究室

村田 道雄 (教授)、花島 慎弥 (准教授)、梅川 雄一 (助教)

## <主な研究テーマ>

- (1) 膜脂質と分子集合体の構造と機能
- (2) 脂質とタンパク質の相互作用の分子機構
- (3) 生体分子の化学合成と作用機構研究

## <研究活動概要>

生体膜は非常に複雑で、実験室において化学的に再現するのは困難である。したがって、われわれは純粋な脂質を数種類混合して作成したモデル膜を使って、生体膜の機能を調べている。今回はモデル膜に関する2件の結果を紹介する。

スフィンゴリエリンは、細胞膜に普遍的に含まれる脂質であり、細胞膜の表面にドメインと呼ばれる小さな区画を作ることが知られている。この脂質の天然体と鏡像体を使って、ドメインがどのように形成されているかを蛍光スペクトルで調べた。その結果、天然体と鏡像体は分子同士では混ざり合わないことが分かったが、図1に示す様に巨視的に見ると天然体(488SSM)と鏡像体(594ent-SSM)はほとんど同じように分布していることが分かった。これは、本来スフィンゴリエリンが非常に小さなドメインを形成しやすい事で説明がつく(文献1)。

枝分かれ脂質は、温度や塩濃度が大きく変化しても、柔軟な構造を保持する優れた特性がある。そのため、細胞膜を模倣したモデル膜の材料として重宝されている。図2では、枝分かれ脂質に使われるフィタノイル鎖を2つ持つリン脂質がどのような形をしているかを調べた。その結果、枝分かれのない脂質の鎖が比較的まっすぐに伸びているのに対して、枝分かれ脂質は途中で屈曲した形(bの図)を取りやすいことが分かった。この炭化水素鎖の形と方向によって、枝分かれ脂質の優れた特性がある程度説明できることが明らかとなった(文献2)。

## <参考文献>

1. Yano, Y.; Hanashima, S.; Tsuchikawa, H.; Yasuda, T.; Slotte, J. P.; London, E.; Murata, M. *Biophys. J.* **2020**, *119*, 539-552.
2. Tsuchikawa, H.; Ono, T.; Yamagami, M.; Umegawa, Y.; Shinoda, W.; Murata, M. *Biochemistry* **2020**, *59*, 3929-3938.

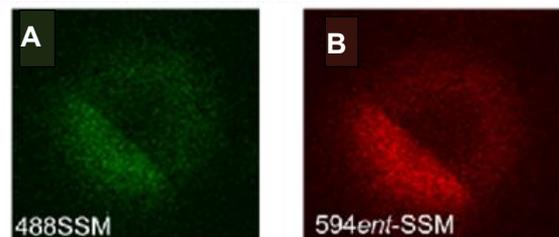


図1. 緑色蛍光色素 488SSM と赤色蛍光色素 594ent-SSM を用いて、同一のリポソームを可視化した蛍光顕微鏡像。

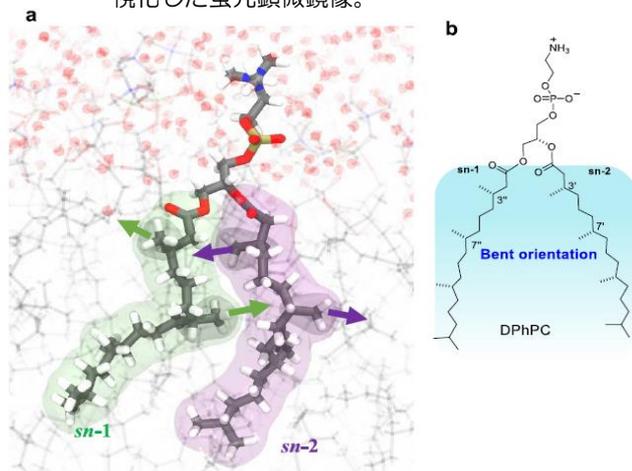


図2. 枝分かれ脂質の平均配向は左右の鎖で微妙に異なっている。Sn-1 鎖ではメイル基が上向きである一方で、Sn-2 鎖では下向きである。

# 生物無機化学研究室

船橋 靖博 (教授)、野尻 正樹 (講師)、畑中 翼 (助教)

## <主な研究テーマ>

- (1) 金属蛋白質の機能と構造の相関の解明
- (2) 光増感能を有する新規金属錯体の合成
- (3) 生理活性物質の金属錯体の合成とその作用

## <研究活動概要>

生体内に存在する各種の金属酵素の触媒反応の原理を追究するのみならず、それらの活性部位の構造または反応性を模倣した金属錯体の合成と性質の検討も行っており、それらの知見は新奇の触媒反応の開発や、薬学的な応用などが期待される。

ある種のバクテリアに含まれるメタノール脱水酵素 (Methanol dehydrogenase, MDH)は、その活性部位に希土類元素であるランタノイドを有することが示された。我々はメタン資化脱窒菌から MDH を単離・精製し、重要な捕因子である PQQ (Pyrroloquinoline quinone)と基質との反応に対して、本酵素内でランタノイドが与える影響を系統的に検討している。また、超好熱菌由来の銅型亜硝酸還元酵素を用いて、本酵素の活性部位近傍でプロトン移動に関与するアミノ酸残基の変異体を作成し、その立体構造を単結晶 X線構造解析で確認したのち、基質に対する反応活性について速度論的解析も含めて検討したところ、その酸化還元反応に伴い、プロトン移動が重要な因子として働くことを改めて実証した。

これらの金属酵素活性部位は基質を内包して認識や活性化を行う狭小空間があり、一方、電子移動蛋白質では酸化還元を行う金属中心の周りに"Entatic state"と呼ばれる遷移状態に近い立体構造が保持され、迅速な電子移動を達成している。人工光合成を標榜する光化学の分野でこのような効果を金属錯体に応用するため、二重環状の籠型配位子であるポリアザクリプタンドの内部にルテニウムテルピリジル部位を導入した。基底状態 (GS)については単結晶 X線構造解析と電気化学的手法によって調べ、さらに発光励起状態の<sup>3</sup>MLCT 状態やその失活過程の<sup>3</sup>LF 状態が関わる発光特性の詳細な検討を行ったところ、GS も含めていずれの状態も籠型配位子内部の狭小空間の影響で不安定化しているが、GS -<sup>3</sup>MLCT 状態間のギャップは狭まり、<sup>3</sup>MLCT -<sup>3</sup>LF 状態間のギャップは広がっていることが示唆された。

さらに、天然の生理活性物質として近年注目されている辛子油配糖体(グルコシノレート)の一種であるシニグリン(Sin)が、ミロシナーゼの酵素反応で生分解される過程を、単一の金属イオンの作用によって再現する原理を化学的に解明することに成功した。Sin は HSAB 則でソフトなルイス酸として知られる銀(I)イオンにより水溶液中で速やかに分解される。我々はアセチル化した Sin はメタノール中で銀(I)イオンと準安定な錯体を形成することを見出し、グルコシノレート類として初めてその金属錯体の結晶構造を得て、それに基づく溶液中での分解過程に関する詳細な検討を行った<sup>1</sup>。本系で合成化学的に得られた知見は、酵素反応の模倣としてだけでなく、生理活性を示す他の金属錯体の系と同様に、その作用機序の新たな解明にも繋がる成果である。

## <参考文献>

1. Alba, L. D. V.; Hatanaka, T.; Franco, F. C. Jr.; Nojiri, M.; Noel, M. G.; Funahashi, Y. *Dalton Trans.* **2021**, *in press* (outside front cover).

## 熱・エントロピー科学研究センター

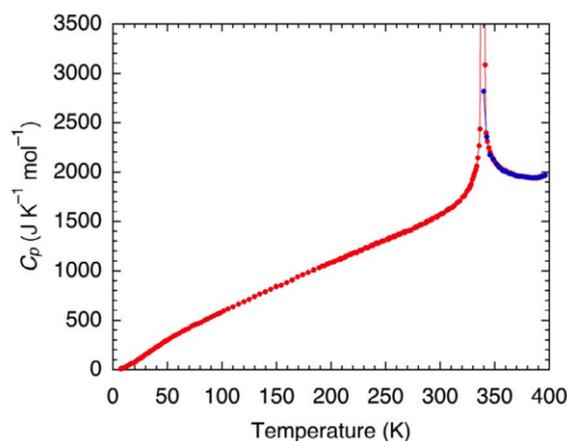
中野 元裕 (教授)、宮崎 裕司 (准教授)、長野 八久 (講師)、高城 大輔 (助教)、一柳 優子 (特任教授・横浜国立大学とのクロスアポイントメント)、香取 浩子 (特任教授・東京農工大学とのクロスアポイントメント)

### <主な研究テーマ>

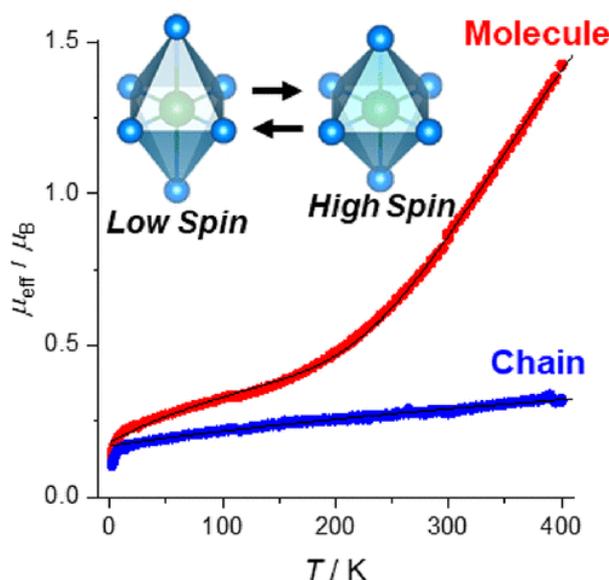
- (1) 磁性体の磁気挙動・相転移とスピン間相互作用の研究
- (2) 結晶中にゆるく束縛された原子・分子の特異なふるまい
- (3) 固体表面に吸着した有機分子凝集体
- (4) 個体発生の熱力学的アプローチ
- (5) 精密マイクロ燃焼熱測定による化学結合エネルギー決定
- (6) 生体分子や高分子の熱力学的挙動

### <研究活動概要>

上記研究テーマにつき、実験熱科学的研究を行った。個々の成果については、**阪大化学熱学レポート No. 41 (2020)** で詳細に報告している。



伝導性スピントスオーバー錯体  
[Fe<sub>2</sub>(bpy)<sub>2</sub>(TCNQ)<sub>2</sub>](TCNQ)<sub>2</sub>の熱容量



[Ni(cyclam)I<sub>2</sub>]錯体に新たに見出された多形とそのスピントスオーバー現象

### <参考文献>

1. Ishikawa, R.; Ueno, S.; Nifuku, S.; Horii, Y.; Iguchi, H.; Miyazaki, Y.; Nakano, M.; Hayami, S.; Kumagai, S.; Katoh, K.; Li, Z.-Y.; Yamashita, M.; Kawata, S. *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*(6), 1278–1285.
2. Horii, Y.; Kanegae, Y.; Takahashi, K.; Fuyuhiko, A.; Noguchi, M.; Suzuki, H.; Nakano, M. *Inorg. Chem.* **2020**, *59*(8), 5418–5423.

# 資料先端研究室

上田 貴洋 (教授)、豊田 二郎 (准教授)、宮久保 圭祐 (准教授)

## <主な研究テーマ>

- (1) ナノ空間に生成する凝縮相の物性と分子間相互作用に関する研究
- (2) ミクロ細孔を用いた分子配列制御による新規物性・機能の探索
- (3) NMR 法による新しい細孔分析法の開発

## <研究活動概要>

金属有機複合体 (MOF) の一種である  $[\text{Cu}(\text{bpy})_2(\text{BF}_4)_2]$  ( $\text{bpy} = 4,4'$ -bipyridine) は、ELM-11 と呼ばれ、 $\text{Cu}(\text{bpy})_2$  の 2 次元正方格子と  $\text{BF}_4^-$  とが交互に積層した 2 次元層状構造をもつ。この積層構造は極めて柔軟であり、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{N}_2$ 、 $\text{CH}_4$  などの気体共存下、一定圧力で層間距離の拡大を伴う急激な気体吸着挙動を示す (Fig. 1)。この挙動は「ゲート吸着」と呼ばれ、小さな圧力範囲で吸着量の大きな変化が得られることから、気体分離材料への応用が期待されている。一方、この特異な吸着挙動に伴う構造転移の分子論的理解は明らかになっていない。本研究では、4,4'-bipyridine 架橋配位子と  $\text{BF}_4^-$  の動態を、 $^1\text{H}$  スピン-格子緩和時間 ( $T_1$ ) で調べるとともに、 $\text{CO}_2$  吸着に伴う ELM-11 の構造転移が、磁気緩和特性 ( $T_1$ 、 $T_2$ ) に及ぼす影響について検討した [1]。 $\text{CO}_2$  吸着前の ELM-11 closed form において、 $^1\text{H}$   $T_1$  の温度依存性を  $\text{Cu}^{2+}$  に由来する常磁性緩和と  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  及び  $^1\text{H}$ - $^{19}\text{F}$  の双極子緩和を考慮して解析することにより、 $\text{BF}_4^-$  の等方的再配向と 4,4'-ビピリジンの C4-C4' 軸周りのねじれ運動が明らかとなった (Fig. 2)。 $\text{BF}_4^-$  の再配向運動の活性化エネルギーは  $32 \text{ kJ mol}^{-1}$  であり、 $\text{B-F}\cdots\text{Cu}^{2+}$  相互作用の存在を示唆している。さらに、 $\text{CO}_2$  吸着に伴う  $T_1$  の変化は、層間距離 ( $\text{Cu}^{2+}$  間距離) の増加によって、 $\text{Cu}^{2+}$  の常磁性緩和に対するスピン密度の減少と電子スピン縦緩和時間の増大の二つの寄与が競合することで生じることがわかった。

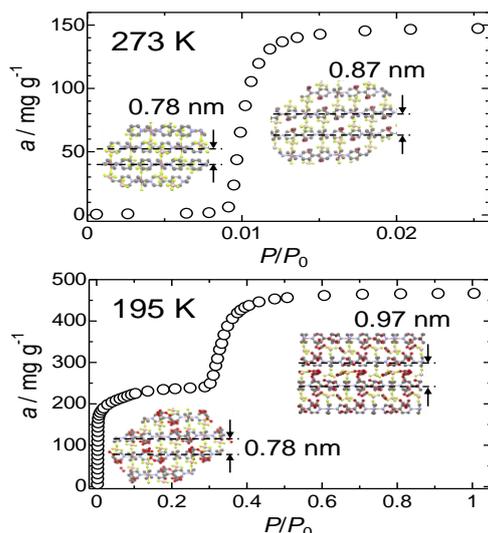


Fig. 1  $\text{CO}_2$  adsorption isotherms of ELM-11 at 273 K and 195 K.

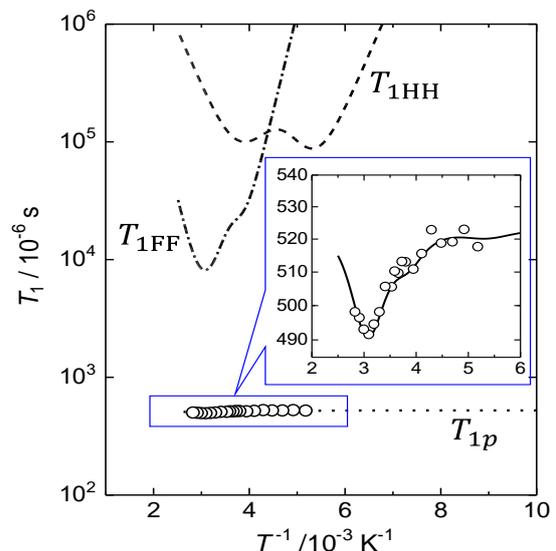


Fig.2 Temperature dependence of  $^1\text{H}$   $T_1$  measured at 25 MHz for the closed form of ELM-11; the inset shows the expansion in the blue square.

## <参考文献>

1. Ohazama, K.; Ueda, T.; Ukai, K.; Ichikawa, M.; Masu, H.; Kajiro, H.; Kanoh, H. *Crystals*, **2020**, *10*, 328.

# 同位体化学研究室

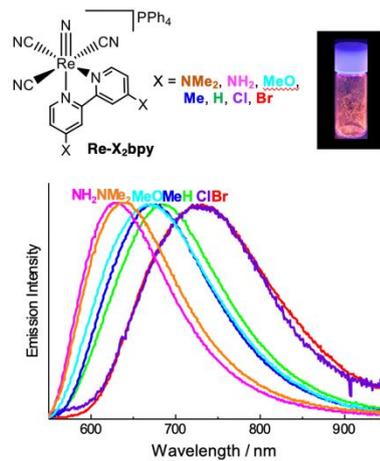
吉村 崇 (教授)、永田 光知郎 (助教)

## <主な研究テーマ>

- (1) 強発光性錯体の合成と発光特性の解明
- (2) 核医学利用のための新しいキレート配位子の開発
- (3) アクチノイド金属錯体の合成と化学的性質の解明
- (4) 放射線安全に資する研究

## <研究活動概要>

(1) ニトリドと3つのシアニド、電子供与能及び受容能が異なる2,2'-ビピリジン誘導体  $X_2bpy$  ( $X = NMe_2, NH_2, OMe, Me, Cl, \text{ and } Br$ ) が結合したレニウム(V)錯体  $[ReN(CN)_3(X_2bpy)]^-$  (**Re- $X_2bpy$** ) を新しく合成し、その性質、特に発光特性を研究した。得られた新規化合物の構造は、単結晶 X 線結晶構造解析により決定した。DMSO 中での吸収スペクトルでは 474–542 nm に吸収極大が観測された。吸収極大は、bpy 誘導体配位子の  $\pi^*$  軌道のエネルギーが低下するにつれて長波長にシフトすることから、この吸収帯はレニウムから  $X_2bpy$  配位子の  $\pi^*$  軌道への MLCT 遷移に帰属した。これらの錯体の DMSO 中での酸化還元電位をサイクリックボルタンメトリーで調べたところ、 $Re(VI/V)$  の 1 電子酸化及び  $X_2(bpy)^{0/-}$  の 1 電子還元にも帰属できる波が観測された。この結果は HOMO が Re 中心、LUMO が  $X_2bpy$  の  $\pi^*$  軌道であることを示唆している。 $[ReN(CN)_3(X_2bpy)]^-$  は固体状態および DMSO 中で発光が観測された。発光極大波長は、**Re-( $NMe_2$ ) $_2bpy$**  < **Re- $OMe_2bpy$**  < **Re- $Me_2bpy$**  < **Re- $bpy$**  < **Re- $Cl_2bpy$**  < **Re- $Br_2bpy$**  の順で観測された。 $bpy$  誘導体配位子の  $\pi^*$  軌道のエネルギーが発光極大波長に大きく影響を及ぼしていることから、MLCT タイプの発光を示すことが分かった。このことは DFT 計算の結果からも支持された。



(2) 溶液から空气中に飛散した核種を捕集する装置を作製し、アルファ線核医学治療で用いられている  $^{223}Ra^{2+}$  の NaCl/クエン酸水溶液からの  $^{223}Ra$  とその子孫核種の空气中への飛散を調べた。その結果、 $^{223}Ra$  からの飛散は観測されず、 $^{211}Pb$  及び  $^{211}Bi$  に由来するガンマ線が観測された。検出された  $^{211}Pb$  及び  $^{211}Bi$  については、希ガスである  $^{219}Rn$  が空气中に飛散した後に  $^{211}Pb$  及び  $^{211}Bi$  に壊変したものと考えられる。検出された  $^{211}Pb$  の放射能は  $^{223}Ra$  水溶液の容器の口径が小さくなるにつれ減少した。これは、容器の口径が減少することによって、水溶液と空気が触れている面積が減少し、そのことが  $^{219}Rn$  の飛散に影響を与えているためと考えられる。

## <参考文献>

1. Nagata, K.; Otsuji N.; Akagi, S.; Fujii, S.; Kitamura, N.; Yoshimura, T. *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 5497-5508
2. Nagata, K.; Shirasaki, K.; Toyoshima, A.; Ooe, K.; Yamamura, T.; Shinohara, A.; Yoshimura, T. *Radiat. Safe. Manage.* **2020**, *19*, 1-9.

# 粒子ビーム化学研究室

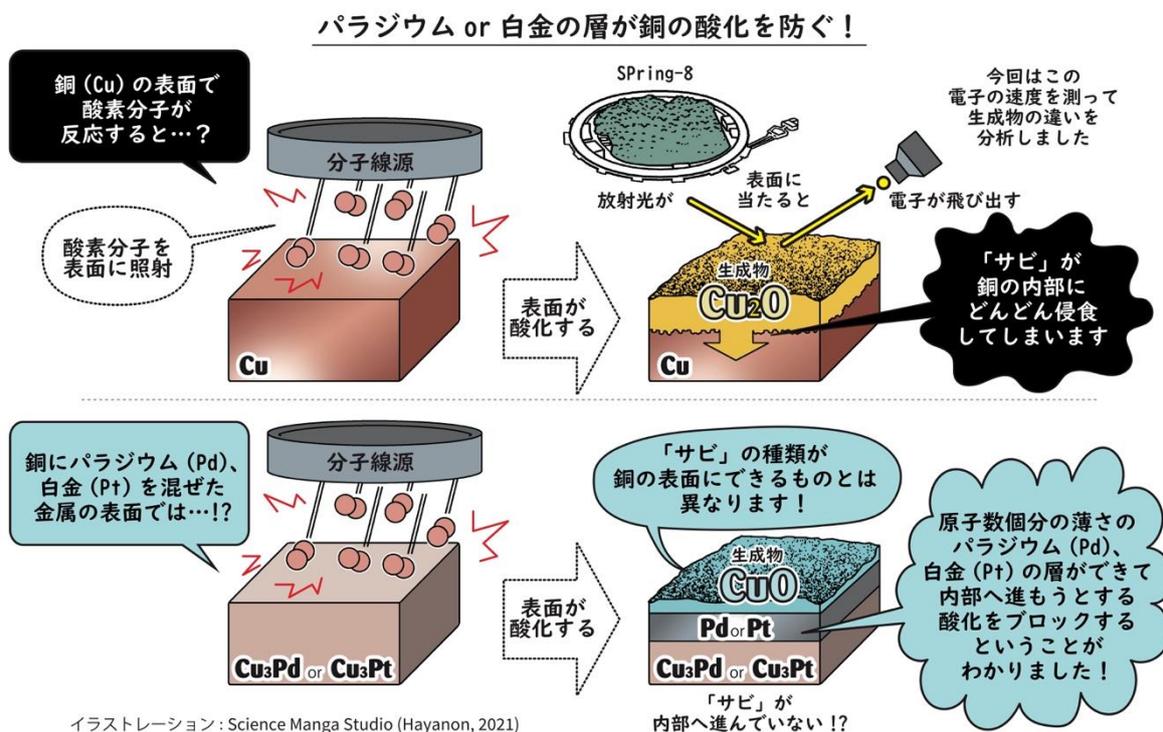
岡田 美智雄 (教授)

## <主な研究テーマ>

- (1) 配向および配列分子ビーム法による表面化学反応立体ダイナミクスの解明
- (2) 赤外分光法・光電子分光法等の表面分光法を用いた金属・半導体表面化学反応の解明
- (3) 放射光施設 SPring-8 を利用した X 線光電子分光による表面化学反応過程の解明

## <研究活動概要>

1. Si(111)表面に CH<sub>3</sub>CN 分子を吸着させ、走査型トンネル顕微鏡を用いて観察し、得られた分子像の試料バイアス依存性を解析し、第一原理計算と比較した。その結果、これまで提案されていた吸着構造と異なる吸着モデル構造を提案した。
2. Cu<sub>3</sub>Pd(111)ならびに Cu<sub>3</sub>Pt(111)を、超熱酸素分子ビームを用いて酸化し、その反応過程を SPring-8 の放射光を用いた X 線光電子分光により追跡した [1, 2]。その結果、下図に示すように合金化により異なる酸化数の銅酸化物薄膜が生成する事がわかり、今後、酸化物触媒の反応制御に向けて基盤となる酸化物薄膜を作製することができた。



## <参考文献>

1. Tsuda, Y.; Gueriba, J.S.; Makino, T.; Diño, W.A.; Yoshigoe, A; Okada, M. *Scientific Reports* **2021**, *11*, 3906.
2. [https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2021/20210219\\_3](https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2021/20210219_3)

## II. 業績リスト

## 原著論文

- O-1** 減衰振動磁場下における磁気ナノ粒子分散液の直線二色性変化に及ぼす粘性率の影響.  
諏訪 雅頼, 魚谷 明良, 塚原 聡, *分析化学* **2020**, *69*, 679-684.
- O-2** Magnetic and viscous modes for physical rotation of magnetic nanoparticles in liquid under oscillating magnetic field.  
Suwa, M.; Uotani, A.; Tsukahara, S. *Appl. Phys. Lett.* **2020**, *116*, 262403.
- O-3** Structural and compositional characteristics of Fukushima release particulate material from Units 1 and 3 elucidates release mechanisms, accident chronology and future decommissioning strategy.  
Martin, P. G.; Jones, C. P.; Bartlett, S.; Ignatyev, K.; Megson-Smith, D.; Satou, Y.; Cipiccia, S.; Batey, D. J.; Rau, C.; Sueki, K.; Ishii, T.; Igarashi, J.; Ninomiya, K.; Shinohara, A. *Sci. Rep.* **2020**, *10*, 22056.
- O-4** Production of  $^{266}\text{Bh}$  in the  $^{248}\text{Cm}(^{23}\text{Na},5n)^{266}\text{Bh}$  reaction and its decay properties.  
Haba, H.; Fan, F.; Kaji, D.; Kasamatsu, Y.; Kikunaga, H.; Komori, Y.; Kondo, N.; Kudo, H.; Morimoto, K.; Morita, K.; Murakami, M.; Nishio, K.; Omtvedt, J. P.; Ooe, K.; Qin, Z.; Sato, D.; Sato, N.; Sato, T.; Shigekawa, Y.; Shinohara, A.; Takeyama, M.; Tanaka, T.; Toyoshima, A.; Tsukada, K.; Wakabayashi, Y.; Wang, Y.; Wulff, S.; Yamaki, S.; Yano, S.; Yasuda, Y.; Yokokita, T. *Phys. Rev. C* **2020**, *102*, 024625, 1-12.
- O-5** Development of a retarding-field type magnetic bottle spectrometer for studying the internal-conversion process of  $^{235\text{m}}\text{U}$ .  
Shigekawa, Y.; Kasamatsu, Y.; Yamakita, Y.; Yasuda, Y.; Watanabe, E.; Kondo, N.; Haba, H.; Shinohara, A. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **2020**, *976*, 164207.
- O-6** Nuclear magnetic field in  $\text{Na}_{0.7}\text{CoO}_2$  detected with  $\mu\text{-SR}$ .  
Sugiyama, J.; Umegaki, I.; Takeshita, S.; Sakurai, H.; Nishimura, S.; Forslund, Ola K.; Nocerino, E.; Matsubara, N.; Mansson, M.; Nakano, T.; Yamauchi, I.; Ninomiya, K.; Kubo, M. K.; Shimomura, K. *Phys. Rev. B* **2020**, *102*, 144431.

- O-7** Solvent extraction of Zr and Hf from HCl by Aliquat 336 using a flow-type extraction apparatus toward online chemical studies of element 104, rutherfordium.  
Kasamatsu, Y.; Kondo, N.; Nakamura, K.; Kuboki, Y.; Ninomiya, H.; Shigekawa, Y.; Watanabe, E.; Yasuda, Y.; Toyomura, K.; Nagase, M.; Yokokita, T.; Komori, Y.; Haba, H.; Yoshimura, T.; Itabashi, H.; Shinohara A. *Solvent Extr. Ion Exch.* **2020**, *38*, 318-327.
- O-8** Optical imaging of muon.  
Yamamoto, S.; Ninomiya, K.; Kawamura, N.; Hirano, Y. *Sci. Rep.* **2020**, *10*, 20790.
- O-9** Irradiation Test of 65-nm Bulk SRAMs With DC Muon Beam at RCNP-MuSIC Facility.  
Mahara, T.; Manabe, S.; Watanabe, Y.; Liao, W.; Hashimoto, M.; Saito, Takeshi Y.; Niikura, M.; Ninomiya, K.; Tomono, D.; Sato, A. *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **2020**, *67*, 1555-1559.
- O-10** Nondestructive High-Sensitivity Detections of Metallic Lithium Deposited on a Battery Anode Using Muonic X-rays.  
Umegaki, I.; Higuchi, Y.; Kondo, Y.; Ninomiya, K.; Takeshita, S.; Tampo, M.; Nakano, H.; Oka, H.; Sugiyama, J.; Kubo, M.K.; Miyake, Y. *Anal. Chem.* **2020**, *92*, 8194-8200.
- O-11** Nuclear isotope production by ordinary muon capture reaction.  
Hashim, I.H.; Ejiri, H.; Othman, F.; Ibrahim, F.; Soberi, F.; Ghani, N.N.A.M.A.; Shima, T.; Sato, A.; Ninomiya, K. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **2020**, *963*, 163749.
- O-12** X-ray Spectroscopy of Muonic Atoms Isolated in Vacuum with Transition Edge Sensors.  
Okada, S.; Azuma, T.; Bennett, D.A.; Caradonna, P.; Doriese, W.B.; Durkin, M.S.; Fowler, J.W.; Gard, J.D.; Hashimoto, T.; Hayakawa, R.; Hilton, G.C.; Ichinohe, Y.; Indelicato, P.; Isobe, T.; Kanda, S.; Katsuragawa, M.; Kawamura, N.; Kino, Y.; Miyake, Y.; Morgan, K.M.; Ninomiya, K.; Noda, H.; O'Neil, G.C.; Okumura, T.; Reintsema, C.D.; Schmidt, D.R.; Shimomura, K.; Strasser, P.; Swetz, D.S.; Takahashi, T.; Takeda, S.; Takeshita, S.; Tatsuno, H.; Ueno, Y.; Ullom, J.N.; Watanabe, S.; Yamada, S. *J. Low Temp. Phys.* **2020**, *200*, 445-451.

- O-13** Per atom muon capture ratios and effects of molecular structure on muon capture by  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>.  
Ninomiya, K.; Kajino, M.; Inagaki, M.; Terada, K.; Sato, A.; Tomono, D.; Kawashima, Y.; Shinohara, A. *J. Radioanal. Nucl. Chem.* **2020**, *324*, 403-408.
- O-14** 連続ミュオン源 RCNP-MuSIC を用いた非接触での物体内部の元素濃度分析実験.  
Ninomiya, K.; Nikura, M.; Sato, A.; Terada, K.; Saito, T.; Matsuzaki, T.; Tomono, D.; Kawashima, Y.; Shinohara, A.; Kubo, K.; Saito, T. *RADIOISOTOPES* **2020**, *69*, 13-17.
- O-15** Preclinical Evaluation of Radiation-Induced Toxicity in Targeted Alpha Therapy Using [211At] NaAt in Mice: A Revisit.  
Yuwei Liu, Y.; Watabe, T.; Kaneda-Nakashima, K.; Ooe, K.; Shirakami, Y.; Toyoshima, A.; Shimosegawa, E.; Nakano, T.; Shinohara, A.; Hatazawa, J. *Transl. Oncol.* **2020**, *13*, 100757, 1-9.
- O-16** Targeted alpha therapy using astatine (211At)-labeled phenylalanine: A preclinical study in glioma bearing mice.  
Watabe, T.; Kaneda-Nakashima, K.; Shirakami, Y.; Liu, Y.; Ooe, K.; Teramoto, T.; Toyoshima, A.; Shimosegawa, E.; Nakano, T.; Kanai, Y.; Shinohara, A.; Hatazawa, J. *Oncotarget* **2020**, *11*, 1388-1398.
- O-17** Spectroscopic Investigation of Interaction between the 4f Electronic System and the Photoexcited Cyclic  $\pi$  System in Terbium(III) Monoporphyrinato Complex.  
Santria, A.; Ishikawa, N. *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 14326-14336
- O-18** Influence of Catalyst Nuclearity in Copper-Catalyzed Aerobic Alcohol Oxidation.  
Krittametaporn, N.; Chantarojsiri, T.; Virachotikul, A.; Phomphrai, K.; Kuwamura, N.; Kojima, T.; Konno, T.; Sangtrirutnugul, P. *Dalton Trans.* **2020**, *49*, 682-689.
- O-19** A 116-Nuclear Metallosupramolecular Cage-of-Cage Showing Multistep Single-Crystal-to-Single-Crystal Transformation.  
Imanishi, K.; Wahyudianto, B.; Kojima, T.; Yoshinari, N.; Konno, T. *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 1827-1833.

- O-20** Elucidating the Structural Chemistry of a Hysteretic Iron(II) Spin-Crossover Compound From its Copper(II) and Zinc(II) Congeners.  
Pask, C. M.; Greatorex, S.; Kulmaczewski, R.; Baldansuren, A.; McInnes, E. J. L.; Bamiduro, F.; Yamada, M.; Yoshinari, N.; Konno, T.; Halcrow, M. A. *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 4833-4841.
- O-21** Crystal structures and temperature-dependent photoluminescence of lanthanide coordination frameworks of mixed-benzenedicarboxylates.  
Chusaard, T.; Ngamjarrojana, A.; Konno, T.; Rujiwatra, A. *J. Coord. Chem.* **2020**, *73*, 333-345.
- O-22** Gas Adsorption, Proton Conductivity and Sensing Potential of Nanoporous Gadolinium Coordination Framework.  
Thammakan, S.; Rodlamul, P.; Semakul, N.; Yoshinari, N.; Konno, T.; Ngamjarrojana, A.; Rujiwatra, A. *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 3053-3061.
- O-23** Hydrogen-bonded metallocsupramolecular helices composed of a nona-protonated spherical  $\text{Rh}^{\text{III}}_4\text{Zn}^{\text{II}}_4$  cluster with twelve carboxylate arms.  
Yamashita, U.; Yoshinari, N.; Sodkhomkhum, E.; Meundaeng, N.; Konno, T. *CrystEngComm* **2020**, *22*, 2700-2704.
- O-24** Homoleptic versus heteroleptic trinuclear systems with mixed L-cysteinate and D-penicillamate regulated by a diphosphine linker.  
Hanprasit, S.; Yoshinari, N.; Saito, D.; Kato, M.; Konno, T. *Dalton Trans.* **2020**, *49*, 3503-3509.
- O-25** Heterochiral-to-Homochiral Structural Transformation in Metallosupramolecular Ionic Crystals.  
Somsri, S.; Kuwamura, N.; Yoshinari, N.; Konno, T. *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 5610-5615.
- O-26** Charge-Separation-Type Ionic Crystals with Mixed  $\text{Au}^{\text{I}}_4\text{Co}^{\text{III}}_2$  and  $\text{Au}^{\text{I}}_4\text{Ni}^{\text{II}}\text{Co}^{\text{III}}$  Hexanuclear Complexes.  
Pratikha, R.; Kojima, T.; Kuwamura, N.; Yoshinari, N.; Konno, T. *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 7344-7351.
- O-27** String of pyrolyzed ZIF-67 particles on carbon fibers for high-performance electrocatalysis.  
Li, B.; Igawa, K.; Chai, J.; Chen, Y.; Wang, Y.; Fam, D. W.; Tham, N. N.; An, T.; Konno, T.; Sng, A.; Liu, Z.; Zhang, H.; Zong, Y. *Energy Storage Mater.* **2020**, *25*, 137-144.

- O-29** A Charge-Separation-Type Ionic Solid Composed of Hexanuclear Complexes with a Macrocyclic Tetragold(I) Metalloligand.  
Pratikha, R.; Inoue, T.; Arai, Y.; Kojima, T.; Yoshinari, N.; Konno, T. *J. Chin. Chem. Soc.* **2020**, *67*, 2189-2197.
- O-30** Modulating the Magnetic Properties of Copper(II)/Nitroxyl Heterospin Complexes by Suppression of the Jahn-Teller Distortion.  
Greatorex, S.; Fokin, S. V.; Kulmaczewski, R.; Yamada, M.; Cespedes, O.; Yoshinari, N.; Konno, T.; Sproules, S.; Ovcharenko, V. I.; Halcrow, M. A. *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 8657-8662.
- O-31** Single-Crystal-to-Single-Crystal Installation of Ln<sub>4</sub>(OH)<sub>4</sub> Cubanes in an Anionic Metallosupramolecular Framework.  
Yoshinari, N.; Meundaeng, N.; Tabe, H.; Yamada, Y.; Yamashita, S.; Nakazawa, Y.; Konno, T. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 18048-18053.
- O-32** Anion-templated assembly of multinuclear copper(ii)-triazole complexes.  
Gopalakrishnan, M.; Krittametaporn, N.; Yoshinari, N.; Konno, T.; Sangtrirutnugul, P. *New J. Chem.* **2020**, *44*, 13764-13770.
- O-33** Self-assembly of Cyclic Hexamers of  $\gamma$ -Cyclodextrin in a Metallosupramolecular Framework with D-Penicillamine.  
Somsri, S.; Kuwamura, N.; Kojima, T.; Yoshinari, N.; Konno, T. *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 9246-9253.
- O-34** Dinickel(II) Complexes with Pyridine-Substituted Bis(triazolylmethyl)amine Ligands: Structures and Magnetic Properties.  
Inthong, J.; Nakarajouyphon, V.; Udomsasporn, K.; Phomphrai, K.; Yoshinari, N.; Konno, T.; Sangtrirutnugul, P. *Polyhedron* **2020**, *191*, 114813.
- O-35** Dimensional Structures and Electrocatalytic Activities of Platinum(II)-Palladium(II)-Manganese(II) Coordination Polymers Controlled by Chloride versus Bromide.  
San Esteban, A. C.; Kuwamura, N.; Kojima, T.; Konno T., *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 14847-14851.
- O-36** A Dynamic Combinatorial Library of Cyclic Mixed Au<sub>1</sub><sub>2</sub>Ni<sup>II</sup> Complexes with Cysteine/Penicillamine Showing Solvent-controlled Crystallization.  
Hanprasit, S.; Yoshinari, N.; Konno, T. *Inorg. Chem.*, **2020**, *59*, 15788-15795.

- O-37** Thermodynamic Properties of Glassy Phonon States Induced by Strong Electron Correlations in Theta-type Organic Charge Transfer Salts.  
Nomoto, T.; Yesil, E.; Yamashita, S.; Akutsu, H.; Nakazawa, Y.  
*Mod. Phys. Lett. B* **2020**, *34*, 2040059, 1-7.
- O-38** Variation of Electronic Heat Capacity of  $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Br Induced by Partial Substitution of Donor Layers.  
Yesil, E.; Imajo, S.; Nomoto, T.; Yamashita, S.; Akutsu, H.; Nakazawa, Y. *J. Phys. Soc. Jpn.* **2020**, *89*, 073701, 1-5.
- O-39** Development of Frequency Tuning AC Modulation Method for High-Pressure Heat Capacity Measurements of Molecules-based Compounds.  
Nomoto, T.; Maruyama, Y.; Yamashita, S.; Akutsu, H.; Nakazawa Y. *Mod. Phys. Lett. B* **2020**, *34*, 2040062, 1-8.
- O-40** Anisotropic Fully Gapped Superconductivity Possibly Mediated by Charge Fluctuations in a Nondimeric Organic Complex.  
Imajo, S.; Akutsu, H.; Kurihara, R.; Yajima, T.; Kohama, Y.; Tokunaga, M.; Kindo, K.; Nakazawa, Y. *Phys. Rev. Lett.* **2020**, *125*, 177002, 1-4.
- O-41** Different Electronic States in the Isomorphous Chiral vs Racemic Organic Conducting Salts,  $\beta''$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>(*S*- and *rac*-PROXYL-CONHCH<sub>2</sub>SO<sub>3</sub>).  
Akutsu, H.; Kohno, A.; Turner, S. S.; Yamashita, S.; Nakazawa, Y. *Mat. Adv.* **2020**, *1*, 3171–3175
- O-42** Structure and Properties of a New Purely Organic Magnetic Conductor,  $\delta'$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>(PO-CONHCH(cyclopropyl)SO<sub>3</sub>)·1.7H<sub>2</sub>O.  
Akutsu, H.; Kohno, A.; Turner, S. S.; Nakazawa Y. *Chem. Lett.* **2020**, *49*, 1345-1348.
- O-43** Structures and Properties of New Organic Conductors: BEDT-TTF, BEST and BETS Salts of the HOC<sub>2</sub>H<sub>4</sub>SO<sub>3</sub><sup>-</sup> Anion.  
Akutsu, H.; Koyama, Y.; Turner, S. S.; Furuta, K.; Nakazawa Y. *Crystals* **2020**, *10*, 775, 1-13.
- O-44** Chiral Molecular Conductor with an Insulator–Metal Transition Close to Room Temperature.  
Short, J. I.; Blundell, T. J.; Krivickas, S. J.; Yang, S.; Wallis, D. J.; Akutsu, H.; Nakazawa, Y.; Martin, L. *Chem. Comm.* **2020**, *56*, 9497-9500.

- O-45** Single Crystal Heat Capacity Measurement of Charge Glass Compound  $\theta$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>CsZn(SCN)<sub>4</sub> Performed under Current and Voltage Application.  
Hino, K.; Nomoto, T.; Yamashita, S.; Nakazawa, Y. *Crystals* **2020**, *10*, 1060, 1-9.
- O-46** A computational examination of the electric-field-induced proton transfer along the interface hydrogen bond between proton donating and accepting self-assembled monolayers.  
Kanematsu, Y.; Kato, H. S.; Yoshimoto, S.; Ueda, A.; Yamamoto, S.; Mori, H.; Yoshinobu, J.; Matsuda, I.; Tachikawa, M. *Chem. Phys. Lett.* **2020**, *741*, 137091, 1-4.
- O-47** Structural Characterization and Photoluminescence Properties of Monolayer Perylene on Graphite Surface.  
Yamada, T.; Araragi, K.; Kato, H. S.; Munakata, T. *J. Phys. Chem. C* **2020**, *124*, 12485-12491.
- O-48** The Role of Initial and Final States in Molecular Spectroscopies – the Example of Tetraphenyldibenzoperiflanthene (DBP) on Graphite.  
Kirchhübel, T.; Kera, S.; Munakata, T.; Ueno, N.; Shiraishi, R.; Yamaguchi, T.; Yonezawa, K.; Ueba, T.; Bussolotti, F.; Yang, J.; Yamada, T.; Mori, R.; Kunieda, S.; Hümpfner, T.; Gruenewald, M.; Forker, R.; Fritz, T. *J. Phys. Chem. C* **2020**, *124*, 19622-19638.
- O-49** Coulomb blockade transport emerged in quasi one-dimensional PEDOT: PSS fiber.  
Akai-Kasaya M.; Ogawa N.; and Kakinoki S. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* **2020**, *835*, 12017-12017.
- O-50** Evolving conductive polymer neural networks on wetware.  
Akai-Kasaya M.; Hagiwara N.; Hikita W.; Okada M.; Sugito Y.; Kuwahara Y.; and Asai T., *Jpn. J. Appl. Phys.* **2020**, *59*, 060601, 1-9.
- O-51** 単層カーボンナノチューブとポリ酸によるニューロモルフィックランダムネットワークデバイス  
田中啓文, 赤井恵, 浅井哲也, 小川琢治, *電子情報通信学会論文誌* **2020**, J103-C, *59*, 53-60.

- O-52** Domain-based local pair natural orbital CCSD (T) calculations of strongly correlated electron systems: Examination of dynamic equilibrium models based on multiple intermediates in S1 state of photosystem II.  
Miyagawa, K.; Kawakami, T.; Suzuki, Y.; Isobe, H.; Shoji, M.; Yamanaka, S.; Okumura, M.; Nakajima, T.; Yamaguchi, K. *Mol. Phys.* **2020**, *118*, 1666171, 1-11.
- O-53** Comparison of Effective Exchange Integrals of HH and H-He-H Chains vs. Single Molecules: A Theoretical Study.  
Tada, K.; Kawakami, T.; Kitagawa, Y.; Okumura, M.; Yamaguchi, K.; Tanaka, S. *Chem. Lett.* **2020**, *49*, 137-140.
- O-54** DFT Study for Selective Adsorption of 1,3-Dimethyltrisulfane Responsible for Aged Odor in Japanese Sake Using Supported Gold Nanoparticles.  
Sonoura, A.; Hayashi, A.; Ato, Y.; Koga, H.; Murayama, H.; Tokunaga, M.; Okumura, M. *Chem. Lett.* **2020**, *49*, 218-221.
- O-55** Facile NO-CO elimination over zirconia-coated Cu (1 1 0) surfaces: Further evidence from DFT+ U calculations.  
Koga, H.; Hayashi, A.; Ato, Y.; Tada, K.; Hosokawa, S.; Tanaka, T.; Okumura, M. *Appl. Surf. Sci.* **2020**, *508*, 145252, 1-11.
- O-56** UNO (ULO) active space for multireference calculations on classical and quantum computers. Revisit to the iron-sulfur complexes.  
Miyagawa, K.; Shoji, M.; Isobe, H.; Yamanaka, S.; Kawakami, T.; Okumura, M.; Yamaguchi, K. *Chem. Phys. Lett.* **2020**, *746*, 137252, 1-9.
- O-57** Theory of chemical bonds in metalloenzymes XXIV electronic and spin structures of FeMoco and Fe-S clusters by classical and quantum computing.  
Miyagawa, K.; Shoji, M.; Isobe, H.; Yamanaka, S.; Kawakami, T.; Okumura, M.; Yamaguchi, K. *Mol. Phys.* **2020**, *118*, e1760388, 1-9.
- O-58** Excellent Catalytic Activity of a Pd-Promoted MnO<sub>x</sub> Catalyst for Purifying Automotive Exhaust Gases.  
Hosokawa, S.; Shibano, T.; Koga, H.; Matsui, M.; Asakura, H.; Teramura, K.; Okumura, M.; Tanaka, T. *Chem. Cat. Chem.* **2020**, *12*, 4276-4280.

- O-59** Clarification of the Relationship between the Magnetic and Conductive Properties of Infinite Chains in Trioxotriangulene Radical Crystals by Spin - Projected DFT/Plane - Wave Calculations.  
Tada, K.; Kawakami, T.; Tanaka, S.; Okumura, M.; Yamaguchi, K. *Adv. Theory Simul.* **2020**, *3*, 2000050, 1-17.
- O-60** Theoretical Investigation of the Heterojunction Effect on the Catalytic Activity and Selectivity of an Au@NiO Core-Shell Catalyst in Aerobic Oxidation.  
Hayashi, A.; Tada, K.; Koga, H.; Kawakami, T.; Yamanaka, S.; Okumura, M. *J. Phys. Chem. C* **2020**, *124*, 17039-17047.
- O-61** Electronic and spin structures of CaMn<sub>4</sub>O<sub>x</sub> clusters in the S-0 state of the oxygen evolving complex of photosystem II. Domain-based local pair natural orbital (DLPNO) coupled-cluster (CC) calculations using optimized geometries and natural orbitals (UNO) by hybrid density functional theory (HDFT) calculations.  
Miyagawa, K.; Yamanaka, S.; Isobe, H.; Shoji, M.; Kawakami, T.; Taniguchi, M.; Okumura, M.; Yamaguchi, K. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2020**, *22*, 27191-27205.
- O-62** Theoretical study of selective hydrogenolysis of methyl vinyl carbinol over Au-Ni bimetallic catalyst: Toward constructing a working hypothesis for the role of dichloroethane solvent and perimeter sites.  
Ato, Y.; Hayashi, A.; Sonoura, A.; Koga, H.; Ishida, T.; Tokunaga, M.; Okumura, M. *Chem. Phys. Lett.* **2020**, *754*, 137773, 1-8.
- O-63** Relative stability among intermediate structures in S-2 state of CaMn<sub>4</sub>O<sub>5</sub> cluster in PSII by using hybrid-DFT and DLPNO-CC methods and evaluation of magnetic interactions between Mn ions.  
Miyagawa, K.; Kawakami, T.; Suzuki, Y.; Isobe, H.; Shoji, M.; Yamanaka, S.; Okumura, M.; Nakajima, T.; Yamaguchi, K. *J. Photochem. Photobiol. A* **2020**, *405*, 11223, 1-13.
- O-64** Visualization of Charge Migration in Conductive Polymers via Time-Resolved Electrostatic Force Microscopy.  
Kajimoto, K.; Araki, K.; Usami, Y.; Ohoyama, H.; Matsumoto, T. *J. Phys. Chem. A* **2020**, *124*, 5063-5070.
- O-65** Local-field-induced current noise in shape-limited self-doped polyaniline.  
Bao, J.; Otsuka, Y.; Etoh, R.; Usami, U.; Matsumoto, T. *Nanotechnology* **2020**, *31*, 365203, 1-8.

- O-66** Frequency-modulation Kelvin probe force microscopy under tapping mode operation for surfaces with large protrusions.  
Misaka, T.; Kajimoto, K.; Araki, K.; Otsuka, Y.; Matsumoto, T. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2020**, *59*, 90906, 1-5.
- O-67** Homogeneous chemical state of self-doped polyaniline sub-micrometer thickness lines fabricated by fountain-pen lithography.  
Bao, J.; Otsuka, Y.; Matsumoto T. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2020**, *60*, 15002, 1-6.
- O-68** Space – and – speed Slice Imaging of Molecular Photodissociation: Stereodirectionality and Chirality.  
Palazzetti, F.; Lombardi, A.; Nakamura, M.; Tsai, P.-Y.; Che, D.-C.; Kasai, T.; Lin, K.-C.; Aquilanti, V. *Acc. Nazionale Sci.* **2020**, *1*, 49-54.
- O-69** Evidence of Direct Dissolution of CO<sub>2</sub> into the Ionic Liquid [C<sub>4</sub>min] [NTf<sub>2</sub>] during Their Initial Interaction.  
Teramoto, T.; Ohoyama, H *J. Phys. Chem. B*, **2020**, *124*, 8331-8339.
- O-70** UV-Photodissociation of Halothane in a Focused Molecular Beam: Space-Speed Slice-Imaging of Competitive Bond Breaking into Spin-Orbit Selected Chlorine and Bromine Atoms.  
Che, D.-C.; Nakamura, M.; Chang, H.-P.; Lin, K.-C.; Kasai, T.; Aquilanti, V.; Palazzetti, F. *J. Phys. Chem. A* **2020**, *124*, 5288-5296.
- O-71** Allosteric Communication with the Retinal Chromophore upon Ion Binding in a Light-Driven Sodium Ion-Pumping Rhodopsin.  
Otomo, A.; Mizuno, M.; Inoue, K.; Kandori, H.; Mizutani, Y. *Biochemistry* **2020**, *59*, 520-529.
- O-72** Nonbonded Atomic Contacts Drive Ultrafast Helix Motions in Myoglobin.  
Tahara, S.; Mizuno, M.; Mizutani, Y. *J. Phys. Chem. B* **2020**, *124*, 5407-5414.
- O-73** Unique Electronic Structures of the Highly Ruffled Hemes in Heme-degrading Enzymes of *Staphylococcus aureus*, IsdG and IsdI, by Resonance Raman and Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopies.  
Takahashi, S.; Nambu, S.; Matsui, T.; Fujii, H.; Ishikawa, H.; Mizutani, Y.; Tsumoto, K.; Ikeda-Saito, M. *Biochemistry* **2020**, *59*, 3918-3928.

- O-74** Formation of Perylenes by Oxidative Dimerization of Naphthalenes Bearing Radical Sources.  
Hirao, Y.; Okuda, T.; Hamamoto, Y.; Kubo, T. *ChemPlusChem* **2020**, *85*, 101-109.
- O-75** Switchable Conformational Isomerization of an Overcrowded Tris-tricyclic Aromatic Ene.  
Nishiuchi, T.; Ito, R.; Stratmann, E.; Kubo, T. *J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 179-186.
- O-76** Three-dimensional graphene nanoribbons as a framework for molecular assembly and local probe chemistry.  
Kawai, S.; Krejčí, O.; Nishiuchi, T.; Sahara, K.; Kodama, T.; Pawlak, R.; Meyer, E.; Kubo, T.; Foster, A. S. *Sci. Adv.* **2020**, *6*, eaay8913-1-6.
- O-77** Synthesis and Electronic Properties of the 1-Naphthoxyl Radical.  
Hirao, Y.; Marutani, M.; Tachibana, N.; Kubo, T. *Chem. Lett.* **2020**, *49*, 153-154.
- O-78** Duality of Reactivity of a Biradicaloid Compound with an *o*-Quinodimethane Scaffold.  
Sahara, K.; Abe, M.; Zipse, H.; Kubo, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 5408-5418.
- O-79** Chiral Tetraarylmethane Derivative with Metal-Coordinating Ability.  
Matsumoto, K.; Miki, K.; Tanaka, R.; Matsuda, T.; Nehira, T.; Hirao, Y.; Kurata, H.; Pescitelli, G.; Kubo, T. *Asian. J. Org. Chem.* **2020**, *9*, 652-659.
- O-80** Low-Temperature Removal of Dissociated Bromine by Silicon Atoms for an On-Surface Ullmann Reaction.  
Sun, K.; Nishiuchi, T.; Sahara, K.; Kubo, T.; Foster, A. S.; Kawai, S. *J. Phys. Chem. C* **2020**, *124*, 19675-19680.
- O-81** Structure Determination and Negative Differential Resistance of Tetraarylporphyrin/Polyoxometalate 2:1 Complexes.  
Yamazaki, Y.; Yamashita, K.; Tani, Y.; Aoyama, T.; Ogawa, T. *J. Mater. Chem. C* **2020**, *8*, 14423-14430.

- O-82** Single-Molecular Bridging in Static Metal Nanogap Electrodes Using Migrations of Metal Atom.  
Naitoh, Y.; Tani, Y.; Koyama, E.; Nakamura, T.; Sumiya, T.; Ogawa, T.; Misawa, G.; Shima, H.; Sugawara, K.; Suga, H.; Akinaga, H. *J. Phys. Chem. C* **2020**, *124*, 14007-14015.
- O-83** Hybridized Kondo State Formed by  $\pi$  Radical Assemblies.  
Saiful, I.; Inose, T.; Tanaka, D.; Mishra, P.; Ogawa, T.; Komeda, T. *J. Phys. Chem. C* **2020**, *124*, 12024-12029.
- O-84** Mechanoresponsive Turn-On Phosphorescence by a Desymmetrization Approach.  
Tani, Y.; Komura, M.; Ogawa, T. *Chem. Commun.* **2020**, *56*, 6810-6813.
- O-85** Single-Walled Carbon Nanotube Absolute-Handedness Chirality Assignment Confirmation using Metalized-Porphyrin's Supramolecular Structures via STM Imaging Technique.  
El-Mageed, A. I. A. A.; Ogawa, T. *Chirality*, **2020**, *32*, 345-352.
- O-86** Synthesis of Porphyrinquinone and Doubly - Fused Diporphyrin Quinone Through Oxidation of Diarylporphyrins Using a Hypervalent Iodine Compound.  
Yamashita, K.; Hirano, D.; Fujimaki, K.; Sugiura, K. *Chem. Asian J.* **2020**, *15*, 3037-3043.
- O-87** Metal Complexes of 5,15 - Porphyrinquinones: Systematic Study of Crystal Structure, Electronic Structure, and Lewis Acidity.  
Yamashita, K.; Hirano, D.; Sugiura, K. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2020**, 3507-3516.
- O-88** Silver(I)-Selective Electrodes Based on Rare Earth Element Double-Decker Porphyrins.  
Joon, N. K.; Barnsley, J. E.; Ding, R.; Lee, S.; Latonen, R. M.; Bobacka, J.; Gordon, K. C.; Ogawa, T.; Lisak, G. *Sensors and Actuators B: Chemical* **2020**, *305*, 127311.
- O-89** Efficient Synthesis of Arylenedioxy - Bridged Porphyrin Dimers through Catalyst - Free Nucleophilic Aromatic Substitution.  
Yamashita, K.; Kuramochi, N.; Pham Qui Van, H.; Furutani, K.; Ogawa, T.; Sugiura, K. *ChemPlusChem* **2020**, *85*, 217-226.

- O-90** Facile redox-induced aromatic-antiaromatic interconversion of a  $\beta$ -tetracyano-21,23-dithiaporphyrin under ambient conditions.  
Yamashita, K.; Nakajima, K.; Honda, Y.; Ogawa, T. *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 3633-3640.
- O-91** Structural basis for Glycan-receptor binding by mumps virus hemagglutinin-neuraminidase.  
Forgione, R. E.; Carluccio, C. C.; Kubota, M.; Manabe, Y.; Fukase, K.; Molinaro, A.; Hashiguchi, T.; Marchetti, R.; Silipo, A. *Sci. Rep.* **2020**, *10*, 1589.
- O-92** Efficient synthesis of antigenic trisaccharides containing *N*-acetylglucosamine: protection of NHAc as NAc<sub>2</sub>.  
Tsutsui, M.; Sianturi, J.; Masui, S.; Tokunaga, K.; Manabe, Y.; Fukase, K. *Eur. J. Org. Chem.* **2020**, 1802-1810.
- O-93** Deficiency of sphingomyelin synthase 2 prolongs survival by the inhibition of lymphoma infiltration through ICAM-1 reduction.  
Taniguchi, M.; Ueda, Y.; Matsushita, M.; Nagaya, S.; Hashizume, C.; Arai, K.; Kabayama, K.; Fukase, K.; Watanabe, K.; Wardhani, LO.; Hayashi, K.; Okazaki, T. *FASEB J.* **2020**, *34*, 3838-3854.
- O-94** Homeostatic and pathogenic roles of GM3 ganglioside molecular species in TLR4 signaling in obesity.  
Kanoh, H.; Nitta, T.; Go, S.; Inamori, K.; Veillon, L.; Nihei, W.; Fujii, M.; Kabayama, K.; Shimoyama, A.; Fukase, K.; Ohto, U.; Shimizu, T.; Watanabe, T.; Shindo, H.; Aoki, S.; Sato, K.; Nagasaki, M.; Yatomi, Y.; Komura, N.; Ishida, H.; Kiso, M.; Natori, Y.; Yoshimura, Y.; Cattaneo, A.; Letizia, M.; Ciampa, M.; Mauri, L.; Prinetti, A.; Sonnino, S.; Suzuki, A.; Ando, H.; Inokuchi, JI. *EMBO J.* **2020**, e101732.
- O-95** Lymphoid tissue-resident *Alcaligenes* establish an intracellular symbiotic environment by creating a unique energy shift in dendritic cells.  
Hosomi, K.; Shibata, N.; Shimoyama, A.; Uto, T.; Nagatake, T.; Tojima, Y.; Nishino, T.; Takeyama, H.; Fukase, K.; Kiyono, H.; Kunisawa, J. *mBio* **2020**, *11*, 561005.
- O-96** Discrimination of cellular developmental states focusing on glycan transformation and membrane dynamics by using BODIPY-tagged lactosyl ceramide.  
Arai, K.; Ohtake, A.; Daikoku, S.; Nagaya, S.; Suzuki, K.; Ito, Y.; Kabayama, K.; Fukase, K.; Kanie, Y.; Kanie, O. *Org. Biomol. Chem.* **2020**, *18*, 3724-3733.

- O-97** Temporal analysis of localization and trafficking of glycolipids.  
Arai, K.; Kanie, Y.; Kanie, O.; Fukase, K.; Kabayama, K.  
*Biochem. Biophys. Res. Commun.* **2020**, *532*, 19-24.
- O-98** Immunological Evaluation of Co-Assembling a Lipidated Peptide Antigen and Lipophilic Adjuvants: Self-Adjuvanting Anti-Breast-Cancer Vaccine Candidates.  
Aiga, T.; Manabe Y., Ito K., Chang, TC.; Kabayama, K.; Ohshima, S.; Kametani, Y.; Miura, A.; Furukawa, H.; Inaba, H.; Matsuura, K.; Fukase, K. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2020**, *59*, 17705-17711.
- O-99** Adjuvant activity of synthetic lipid A of *Alcaligenes*, a gut-associated lymphoid tissue-resident commensal bacterium, to augment antigen-specific IgG and Th17 responses in systemic vaccine.  
Wang, Y.; Hosomi, K.; Shimoyama, A.; Yoshii, K.; Yamaura, H.; Nagatake, T.; Nishino, T.; Kiyono, H.; Fukase, K. Kunisawa, J., *Vaccines* **2020**, *20*, E395.
- O-100** Chemically synthesized *Alcaligenes* lipid A shows a potent and safe nasal vaccine adjuvant activity for the induction of *Streptococcus pneumoniae*-specific IgA and Th17 mediated protective immunity.  
Yoshii, K.; Hosomi, K.; Shimoyama, A.; Wang, Y.; Yamaura, H.; Nagatake, T.; Suzuki, H.; Lan, H.; Kiyono, H.; Fukase, K.; Kunisawa, J. *Microorganisms* **2020**, *8*(8), 1102.
- O-101** Lymphoid tissue-resident *Alcaligenes* establish an intracellular symbiotic environment by creating a unique energy shift in dendritic cells.  
Hosomi, K.; Shibata, N.; Shimoyama, A.; Uto, T.; Nagatake, T.; Tojima, Y.; Nishino, T.; Takeyama, H.; Fukase, K.; Kiyono, H.; Kunisawa, J. *Front. Microbiol.* **2020**, *11*, 561005.
- O-102** The Role of Toll-Like Receptor 4 in Infectious and Non Infectious Inflammation; Chemically Synthesized TLR4 Ligands, Their Immunological Functions, and Potential as Vaccine Adjuvant.  
Shimoyama, A.; Fukase, K. *Prog. Inflamm. Res.* **2020**, *87*, 1-19.
- O-103** Unveiling Molecular Recognition of Sialoglycans by Human Siglec-10.  
Forgione, R.E.; Di Carluccio, C.; Guzmán-Caldentey, J.; Gaglione, R.; Battista, F.; Chiodo, F.; Manabe, Y.; Arciello, A.; Del Vecchio, P.; Fukase, K.; Molinaro, A.; Martín-Santamaría, S.; Crocker, P.R.; Marchetti, R.; Silipo, A. *iScience* **2020**, *23*, 101231.

- O-104** Total Syntheses of C60- and C100-Dolichols.  
Hirao, K.; Ono, R.; Manabe, Y.; Masui, S.; Atomi, H.; Fukase, K.  
*J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 11549-11559.
- O-105** Concise and Reliable Syntheses of Glycodendrimers via Self-Activating Click Chemistry: A Robust Strategy for Mimicking Multivalent Glycan–Pathogen Interactions.  
Farabi, K.; Manabe, Y.; Ichikawa, H.; Miyake, S.; Tsutsui, M.; Kabayama, K.; Yamaji, T.; Tanaka, K.; Hung, S.-C.; Fukase, K.  
*J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 16014-16023.
- O-106** Detachment RAW264.7 macrophages from a culture dish using ultrasound excited by a Langevin transducer.  
Kuriyama T.; Fukuma Y.; Imashiro C.; Kabayama K.; Kurashina Y.; Takemura K. *J. Biosci. Bioeng.* **2020**, *131*, 320-325.
- O-107** Total Chemical Synthesis of a Nonfibrillating Human Glycoinsulin.  
Hossain, M. A.; Okamoto, R.; Karas, J. A.; Praveen, P.; Liu, M.; Forbes, B. E.; Wade, J. D.; Kajihara, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 1164-1169.
- O-108** Chemical Synthesis of Ubiquitinated High-Mannose-Type N-Glycoprotein CCL1 in Different Folding States.  
Izumi, M.; Araki, H.; Tominaga, M.; Okamoto, R.; Kajihara, Y.  
*J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 16024-16034.
- O-109** Acceleration and Deceleration Factors on the Hydrolysis Reaction of 4,6-O-Benzylidene Acetal Group  
Maki, Y.; Nomura, K.; Okamoto, R.; Izumi, M.; Kajihara, Y. *J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 15849-15856
- O-110** Chemical Synthesis of an Erythropoietin Glycoform Having a Triantennary N-Glycan: Significant Change of Biological Activity of Glycoprotein by Addition of a Small Molecular Weight Trisaccharide.  
Maki, Y.; Okamoto, R.; Izumi, M.; Kajihara, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 20671-20679.
- O-111** Ultra-large chemical libraries for the discovery of high-affinity peptide binders.  
Quartararo, A. J.; Gates, Z. P.; Somsen, B. A.; Hartrampf, N.; Ye, X.; Shimada, A.; Kajihara, Y.; Ottmann, C.; Pentelute, B. L. *Nat. Commun.* **2020**, *11*, 3183.

- O-112** Identification of the epitope of 10-7G glycan antibody to recognize cancer-associated haptoglobin.  
Morishita, K.; Maki, Y.; Takamatsu, S.; Ito, N.; Koda, S.; Motooka, K.; Kamada, Y.; Kajihara, Y.; Miyoshi, E. *Anal. Biochem.* **2020**, *593*, 93, 113588.
- O-113** Conformation and orientation of branched acyl chains responsible for physical stability of diphytanoylphosphatidylcholine.  
Tsuchikawa, H.; Ono, T.; Yamagami, M.; Umegawa, Y.; Shinoda, W.; Murata, M. *Biochemistry*, **2020**, *59*, 3929-3938.
- O-114** Sphingomyelin (and ent-sphingomyelin) form homophilic nanometer-sized subdomains within liquid ordered domains.  
Yano, Y.; Hanashima, S.; Tsuchikawa, H.; Yasuda, T.; Slotte, J. P.; London, E.; Murata, M. *Biophys. J.* **2020**, *119*, 539-552.
- O-115** Interactions of OSW-1 with lipid bilayers in comparison with digitonin and soyasaponin.  
Malabed, R.; Hanashima, S.; Murata, M.; Sakurai, K.; *Langmuir*, **2020**, *36*, 3600-3610.
- O-116** Pivotal role of interdigitation in interleaflet interactions: Implications from molecular dynamics simulations.  
Seo, S.; Murata, M.; Shinoda, W. *J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, *11*, 5171–5176.
- O-117** Efficient diversification of GM3 gangliosides: Via late-stage sialylation and dynamic glycan structural studies with <sup>19</sup>F solid-state NMR.  
Takahashi, M.; Shirasaki, J.; Komura, N.; Sasaki, K.; Tanaka, H.-N.; Imamura, A.; Ishida, H.; Hanashima, S.; Murata, M.; Ando, H. *Org. Biomol. Chem.* **2020**, *18*, 2902-2913.
- O-118** Silkworm-baculovirus expression system and characterization of human and mouse CD1d proteins.  
Kusaka, H.; Kita, S.; Tadokoro, T.; Yoshida, K.; Kasai, Y.; Niiyama, H.; Fujimoto, Y.; Hanashima, S.; Murata, M.; Sugiyama, S.; Ose, T.; Kuroki, K.; Maenaka, K. *Protein Express. Purif.* **2020**, *172*, 105631.
- O-119** Growth of protein crystals in high-strength hydrogels with the dialysis membrane.  
Sugiyama, S.; Kakinouchi, K.; Adachi, H.; Nagasawa, T.; Kunimune, N.; Murata, M.; Mori, Y. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2020**, *60*, 015506.

- O-120** Discovery of a new sialic acid binding region that regulates Siglec-7  
Yamakawa, N.; Yasuda, Y.; Yoshimura, A.; Goshima, A.;  
Crocker, P.R.; Vergoten, G.; Nishiura, Y.; Takahashi, T.;  
Hanashima, S.; Matsumoto, K.; Yamaguchi, Y.; Tanaka, H.;  
Yoshimura, A.; Kitajima, K.; Sato, C. *Scientific  
Reports*, **2020**, *10*, 8647
- O-121** Dinitrogen Activation by a Heterometallic VFe Complex Derived  
from 1,1'-Bis(arylamido)vanadocene.  
Hatanaka, T.; Kusunose, H.; Kawaguchi, H.; Funahashi, Y. *Eur.  
J. Inorg. Chem.* **2020**, 1449-1455.
- O-122** Enantioselective Vinylogous Mannich Reaction of Acyclic  
Vinylketene Silyl Acetals with Ketimines Using Chiral  
Bis(imidazoline)-Cu(II) Catalysts.  
Nakamura, S.; Matsuzaka, K.; Hatanaka T.; Funahashi, Y.  
*Org. Lett.* **2020**, *22*, 2868-2872.
- O-123** Simultaneous Spin-Crossover Transition and Conductivity Switching  
in a Dinuclear Iron(II) Coordination Compound Based on 7,7',8,8'-  
Tetracyano-*p*-quinodimethane.  
Ishikawa, R.; Ueno, S.; Nifuku, S.; Horii, Y.; Iguchi, H.; Miyazaki,  
Y.; Nakano, M.; Hayami, S.; Kumagai, S.; Katoh, K.; Li, Z.-Y.;  
Yamashita, M.; Kawata, S. *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 1278-1285.
- O-124** Coexistence of Spin-Lattice Relaxation and Phonon-Bottleneck  
Processes in Gd(III)-phthalocyaninato Triple-Decker Complexes under  
Highly Diluted Conditions.  
Horii, Y.; Katoh, K.; Miyazaki, Y.; Damjanović, M.; Sato, T.;  
Ungur, L.; Chibotaru, L. F.; Breedlove, B. K.; Nakano, M.;  
Wernsdorfer, W.; Yamashita, M. *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 8076-  
8082.
- O-125** Generation of Sintered Fault Rock and its Implications for Earthquake  
Energetics and Fault Healing.  
Hirono, T.; Kaneki, S.; Ishikawa, T.; Kameda, J.; Tonoike, N.; Ito,  
A.; Miyazaki, Y. *Commun. Earth Env.* **2020**, *1*, 3, 1-8.
- O-126** Solid-State Spin Equilibrium of Ni(cyclam)<sub>2</sub> Complex:  
Magnetostructural Correlations in Two Polymorphs.  
Horii, Y.; Kanegae, Y.; Takahashi, K.; Fuyuhiko, A.; Noguchi, M.;  
Suzuki, H.; Nakano, M. *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 5418–5423.

- O-127** Quenching and Restoration of Orbital Angular Momentum through a Dynamic Bond in a Cobalt(II) Complex.  
Su, S.-Q.; Wu, S.-Q.; Baker, M. L.; Bencok, P.; Azuma, N.; Miyazaki, Y.; Nakano, M.; Kang, S.; Shiota, Y.; Yoshizawa, K.; Kanegawa, S.; Sato, O. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 11434-11441.
- O-128** Structural Dynamics of An ELM-11 Framework Transformation Accompanied with Double-Step CO<sub>2</sub> Gate sorption: An NMR Spin Relaxation Study.  
Ohazama, K.; Ueda, T.; Ukai, K.; Ichikawa, M.; Masu, H.; Kajiro, H.; Kanoh, H. *Crystals*, **2020**, *10*, 328.
- O-129** Dispersal Rate of Radon-219 from Aqueous Radium-223 Solution Containing Sodium Chloride/Citrate.  
Nagata, K.; Shirasaki, K.; Toyoshima, A.; Ooe, K.; Yamamura, T.; Shinohara, A.; Yoshimura, T. *Radiat. Safe. Manage.* **2020**, *19*, 1-9.
- O-130** Synthesis , Structures, and Photoluminescent Properties of Tricyanidonitridorhenium(V) Complexes with Bipyridine-Type Ligands.  
Nagata, K.; Otsuji N.; Akagi, S.; Fujii, S.; Kitamura, N.; Yoshimura, T. *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 5497-5508.
- O-131** Transfer Rates of <sup>225</sup>Ac to Exhaust Air, Surface, and Waste Water under Chemical Operations.  
Yamamura, T.; Shirasaki, K.; Kikunaga, H.; Nagata, K.; Zhang, Z.; Toyoshima, A.; Yoshimura, T.; Shinohara, A. *Radiat. Safe. Manage.* **2020**, *19*, 35-48.
- O-132** Probing the Surface Structure via the Adsorbed Hydrogen Atoms-The Case of Cu(410).  
Gueriba, J.S.; Diño, W.A.; Mizuno, S; Okada, M. *Applied Surface Science* **2020**, *528*, 146433, 1-6.
- O-133** Adsorption of Acetonitrile on Si(111)-(7×7).  
Hong, S.; Min, K.-A.; Park, J.; Kim, H.; Mizutani, H; Okada, M. *ACS Omega* **2020**, *5*, 24179-24185.

## 総説

- R-1** 負ミュオンの化学  
Ninomiya, K.; *RADIOISOTOPES* **2020**, *69*, 227-286.
- R-2**  $\alpha$ 線核医学治療の新たな展開  
渡部直史, 白神宜史, 篠原 厚, *Isotope News*, **2020**, *10(771)*, 2.
- R-3** 探針同期型時間分解静電気力顕微鏡による表面電荷マイグレーションの観測 ; 特集「微小エネルギーの観測と制御」  
松本卓也, 荒木健人, 梶本健太郎, *表面と真空* **2020**, *63*, 245-250.
- R-4** 生体システムの多彩な分子環境を捉える直接液体抽出イオン化法  
大塚洋一, *日本質量分析学会誌*, **2020**, *68*, 59-74.
- R-5** Role of atomic contacts in vibrational energy transfer in myoglobin.  
Mizuno, M.; Mizutani, Y. *Biophys. Rev.* **2020**, *12*, 511-518.
- R-6** アルファ線核医学治療のための薬剤開発の考察(その4) First-in-Human 臨床に向けた要件  
矢野恒夫, 長谷川功紀, 佐藤達彦, 巽光朗, 渡部直史, 藤井博史, 角永悠一郎, 樺山一哉, 深瀬浩一, 米倉義晴, 蜂須賀暁子, 平林容子, *医薬品医療機器レギュラトリーサイエンス*, **2020**, *51*, 364 – 377.
- R-7** Rationale for Translational Research on Targeted Alpha Therapy in Japan —Renaissance of Radiopharmaceuticals Utilizing Astatine-211 and Actinium-225—  
Yano, T; Hasegawa, K.; Sato, T.; Tatsumi, M.; Watabe, T.; Kadonaga, Y.; Kabayama, K.; Fukase, K.; Hachisuka, A.; Hirabayashi, Y.; Fujii, H.; Yonekura, Y. *RADIOISOTOPES* **2020**, *69*, 329-340.
- R-8** Recent advances in self-adjuvanting glycoconjugate vaccines.  
Manabe, Y.; Chang, T.-C.; Fukase, K. *Drug Discov. Today Technol.* **2020**.

- R-9** Session 2SHP report—decoding intracellular architecture using visualizing device development and development and mathematical modeling.  
Kitamura, A.; Kabayama, K. *Biophysical Reviews* **2020**, *12*, 281-282.
- R-10** Efficient Synthesis of Marine Alkaloid Ageladine A and its Structural Modification for Exploring New Biological Activity.  
Iwata, T.; Fukase, K.; Nakao, Y.; Tanaka, K. *Journal of Synthetic Organic Chemistry*, **2020**, *78*, 55-63.
- R-11** 中分子戦略と複合化による高次免疫制御分子の創製  
真鍋良幸, 下山敦史, 樺山一也, 深瀬浩一, 有機合成化学協会誌, **2020**, *78*, 527-537.
- R-12** Studies for Elucidation of Oligosaccharides Functions of Glycoproteins.  
真木勇太, 岡本亮, 村上真淑, 梶原康宏, 有機合成化学協会誌 **2020**, *78*, 1021-1038.
- R-13** Enantiomers of phospholipids and cholesterol: A key to decipher lipid - lipid interplay in membrane.  
Hanashima, S.; Yano, Y.; Murata, M. *Chirality*, **2020**, *32*, 282-298
- R-14** 短寿命放射性核種の合理的な安全規制のためのガイドライン等作成に向けた検討状況  
吉村崇, *Radioisotopes* **2020**, *69*, 233-242.
- R-15** 短寿命アルファ線放出核種の合理的な安全規制のための研究  
吉村崇, 臨床放射線 **2020**, *65*, 985-990.

## 出版物

- B-1** 全固体電池の界面抵抗低減と作製プロセス、評価技術 第4章  
第8節 アニオン性金属錯体をベースとする水和カリウム超イオン伝導体の発見と展望  
吉成 信人, 今野 巧, 技術情報協会 **2020**.
- B-2** 化学便覧 基礎編 改訂6版 第10章 熱的性質  
中澤康浩 (執筆分担), 丸善 **2020**.
- B-3** Dynamics and Allostery of Human Hemoglobin as Elucidated by Time-resolved Resonance Raman Spectroscopy.  
Mizutani, Y. In *Vibrational Spectroscopy in Protein Research*, Ozaki, Y. Ed.; Academic Press, New York, **2020**, pp. 461-483.
- B-4** 構造有機化学 ～基礎から物性へのアプローチまで～  
中筋一弘, 久保孝史, 鈴木孝紀, 豊田真司, 東京化学同人 **2020**.
- B-5** 熱量測定・熱分析ハンドブック 第3版  
稲葉 章, 中澤康浩, 長野八久, 松尾陸祐, 宮崎裕司 (執筆分担), 丸善 **2020**.
- B-6** State Resolved Sticking Probability in Gas-Surface Interaction.  
Vattuone, L.; Okada, M. In *Springer Handbook of Surface Science*, Rocca, M.; Vattuone, L.; Rahman T. Eds.; Springer, Cham, **2020**, pp. 1053-1084.

## その他

- M-1** Anion-exchange of Zr, Hf, and Th by the automated extraction apparatus: toward the chemical study of  $^{104}\text{Rf}$  in  $\text{HNO}_3$   
Watanabe, E.; Yokokita, T.; Kasamatsu, Y.; Hayami, S.; Tonai, K.; Shigekawa, Y.; Haba, H.; Shinohara, A. *RIKEN Accel. Prog. Rep.* 2019, **2020**, 53, 166.
- M-2** 分極有機伝導体  
坏広樹, 低温センター研究報告書 (令和元年度) **2020**, 21-31.
- M-3** タッピングモード走査型プローブエレクトロスプレーイオン化学法の開発—生体組織切片の多彩な生体成分を見える化する  
大塚洋一, 日本の科学者, **2020**, 55, 458-463.
- M-4** 「分子アーキテクニクス研究会」 ; 研究会へようこそ第6回  
松本卓也, 化学 **2020**, 75, 54-55.
- M-5** 大阪大学大学院理学研究科の国際化に関する最近の取り組み  
久保孝史, 生産と技術 **2020**, 72, 108-111.
- M-6** 芳香環を密集させた  $\pi$  クラスタ分子の創製と機能  
西内智彦, 化学と工業 **2020**, 9, 700-701.
- M-7** 糖タンパク質の化学合成  
岡本亮, 真木勇太, 梶原康宏, 日本薬学会, *MEDCHEM NEWS*, **2020**, 30, 186-191.
- M-8** 糖鎖合成の新展開  
梶原康宏, 森口達也, 入谷健斗, 真木勇太, 日本生化学会, *生化学*, **2020**, 92, 378-388.
- M-9** 一次元水素結合ネットワーク型ロジウム (II) -セミキノン錯体の熱容量と相転移  
宮崎裕司, 中野元裕, 低温センター研究報告書 (平成30年度), **2020**, 39-44.
- M-10** 金属有機複合体 IRMOF-1 が提供するマイクロ空間における有機分子の動的挙動と相転移現象  
上田貴洋, 熱測定, **2020**, 47, 64-69.