

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  
2021

# 目 次

はじめに	1
I. 化学専攻における研究活動	
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
II. 業績リスト	
1. 原著論文	23
2. 総説・解説	40
3. 出版物	42
4. その他	43

## 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(全学教育推進機構の1研究室を含む)、物理化学分野7研究室(学際化学講座および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7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18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。

理学研究科付属基礎理学プロジェクトセンター(令和4年度より、フォアフロント研究センターに改組)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、「大阪大学理工情報系オーナー大学院プログラム」が開始されました。このプログラムは、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、化学専攻も積極的に参加しております。また、R3年度末からほとんどの博士後期課程の学生が、JSTの次世代研究者挑戦的研究プログラムに採択され、日本学術振興会の特別研究員(DC1,2)と同等の補助を受けることができます。この画期的な取り組みは、今後5年間続き、さらには大阪大学がその補助事業を引き継ぐ予定となっています。これにより、博士後期過程への進学者が増加すると期待されています。

人事面では、錯体化学研究室から教授1名、熱エントロピー科学研究センターから講師1名が定年退職致しました

令和3年度は、コロナ禍での活動ではありましたが、多くの講義がハイブリッド型となりました。研究室も感染拡大を避けつつ、通常の研究活動ができるようになりました。本冊子には、その回復過程の専攻の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

1. 液液界面現象の新規計測法の開発
2. 磁場を利用したナノスケール力学計測法の開発
3. ラマン光学活性によるタンパク質キラル構造の解析

## 研究活動概要

### 1. 液液界面に吸着した物質の光吸収スペクトルの新規測定法の開発

2相を懸濁させることなく攪拌させる手法を開発した。これによって、界面積を増大させ、界面に吸着した物質の量を増やし、界面における物質の光吸収スペクトルを通常の分光器を用いて測定することに成功した。界面における吸収スペクトルは、水溶液中のそれに対して波長シフトしていることがわかった。さらに、この結果を、DFT計算結果と比較したところ、界面の誘電率を用いて説明できることが明らかになった

### 2. 液液界面における通過速度の測定と数値シミュレーションによる解析

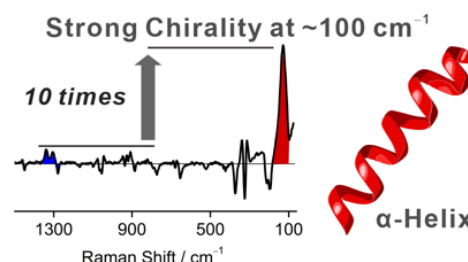
液液界面に新たな機能を付与するために、液液界面における物質の通過速度を測定する新たな手法を検討した。2相を静置することで、物質は、界面通過と界面近傍の拡散によって相間移動を起こす。その実験結果と、界面通過と拡散を考慮した数値シミュレーションとの比較から、液液界面における物質の通過速度を求めた。

### 3. 磁性ナノ粒子の回転挙動の交流磁場周波数依存性

磁性ナノ粒子(MNP)は、磁場により非接触で運動を誘起可能であり、アクティブな微小力学プローブとして応用できる。我々は、交流磁場下でMNP分散液に誘起される磁気直線二色性(MLD)からMNP自体の回転運動を観測できることを実証した。さらに、MLDの磁場周波数スペクトル測定装置を構築し、種々のMNP分散試料を測定した。MNPの組成やサイズによりスペクトル形状が変化するため、MNP自体のキャラクタリゼーション法として期待できる。また、ゲル中に分散した試料では複雑なスペクトルが観測され、MNP周囲の局所的な粘弾性を反映することが示唆された。

### 4. ラマン光学活性によるキラル構造解析

振動準位において分子キラリティを測定するラマン光学活性は、立体配座と絶対配置への鋭敏さから溶液中キラル分子の新たな構造解析法として期待できる。我々は新規測定装置の開発、高感度測定および実験を再現しうる量子力学スペクトル計算法について研究を行っている。低波数領域の測定を可能とし、 $\alpha$ -ヘリックスの“巻き”振動に由来する高強度キラル信号の検出とその帰属を達成した。



## 参考文献

- (1) Tsukahara, S.; Inoshita, S.; Fujiwara, T. *Solvent Extr. Res. Dev., Jpn.* **2021**, 28, 1-10.
- (2) Yamamoto, S.; Ishiro, S.; Kessler, J.; Bouř, P. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, 23, 26501-26509.

# 放射化学研究室

笠松 良崇 (准教授)

## 主な研究テーマ

1. 重・超重元素の化学
2. 原子核壊変の化学効果
3. 核医学用放射性核種の基礎研究
4. 環境放射能の放射化学的研究

## 研究活動概要

1. 104 番元素 Rf のシュウ酸、マロン酸錯体の合成研究を目指し、同族元素の Zr、Hf や擬同族元素の Th を用いて基礎実験を行い、適切な実験条件を模索した。また、102 番元素 No を目指した基礎研究としては、クラウンエーテル抽出実験を目的として 2 族元素を用いた基礎実験を行った。固液抽出の装置を用いた実験を想定し、クラウンエーテル樹脂を用い、酸溶液を変更することで 2 族元素間の抽出挙動が大きく異なる挙動を観測した。また、No の水酸化物沈殿並びに硫酸沈殿を調べる研究も進める中で、2 族元素の質量測定や XAFS 分光測定なども行いその化学種の推定を行った。この時、クラウンエーテル錯体に対しても XAFS 測定を実施した。

また、相対論を考慮した量子化学計算にも取り組み、対象元素の錯体の構造や安定性を調べた。ダイナミクスを取り入れた計算にも取り組んでいる (図参照)。

2.  $^{235}\text{mU}$  にハロゲンを反応させた試料の内部転換の半減期測定と内部転換電子分光測定を行った。スペクトルの形状、ピーク位置などから試料がハロゲンが配位したウラニルであることが分かった。また、フッ化物試料以外の試料ではハロゲンの電気陰性度と化合物の半減期に相関があることが観測された。

3.  $^{211}\text{At}$  を核医学利用することを目指し、アミノ酸への新しいよりクリーンな標識法の開発を行った。電気化学的手法や光反応などを利用して標識を試みた。また、At のハロゲン結合を調べることを目的として、同族の軽いハロゲン元素を用いた基礎実験を進めている。

4. 福島第一原子力発電所の事故により拡散された放射性物質の土壌中での挙動を調べた。複数の地点で調査を行い、土質や有機物含有量の差異などを考慮して Sr や Cs の挙動の違いを考察した。

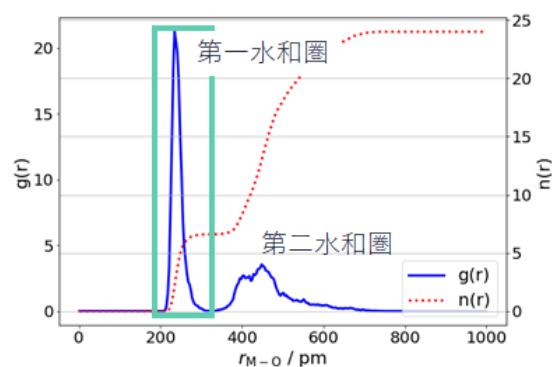


図. Sr 周辺の O の動径分布関数

## 参考文献

- (1) Kasamatsu Y. et al., *Nature Chem.*, **2021**, *13*, 226-230.

# 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

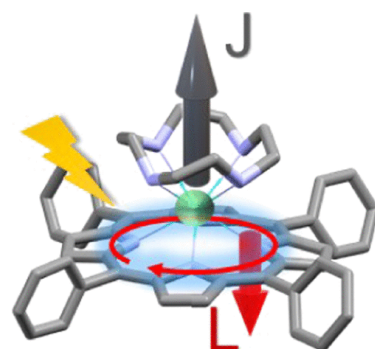


図1 [Dy(TPP)(cyclen)]Clの二つの電子角運動量

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、4f 電子系と、光励起された環状  $\pi$  共役系の間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。

本年度は、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、ポルフィリン錯体について、前年度の Tb 錯体に引き続き、Dy 錯体における J-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 [Dy(TPP)(cyclen)]Cl (図1) について、温度・磁場依存 MCD スペクトル測定を行った。可視領域の 2 つの  $\pi-\pi^*$  電子遷移、Q 帯と B 帯において、前者では MCD パターンの反転、後者では MCD 強度の増大が観測された。(図2) 独自の理論モデルに基づき、J-L 相互作用項の定量に成功した。さらに、ab-initio RASSCF/RASSI 法による量子化学的研究を報告した。

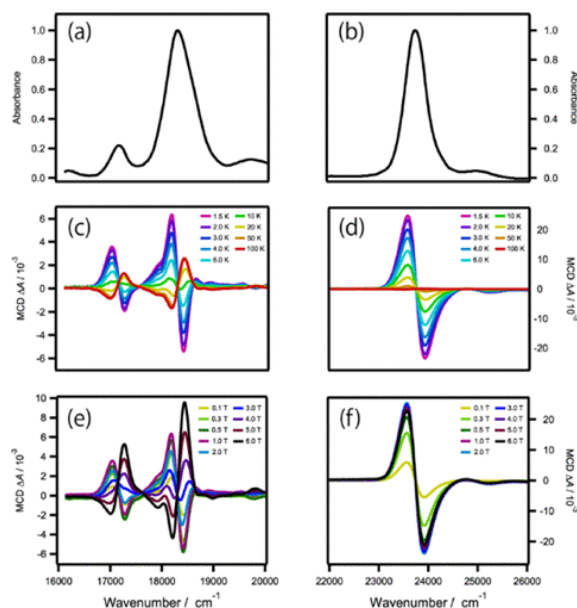


図2 [Dy(TPP)(cyclen)]ClのMCDスペクトルの温度依存性



# 錯体化学研究室

今野 巧 (教授), 吉成 信人 (准教授), 栗村 直人 (助教), 小島 達弘 (助教)

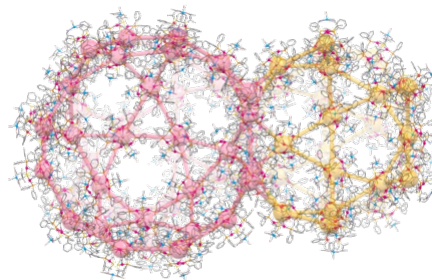
## 主な研究テーマ

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) D-ペニシラミン (D-H<sub>2</sub>pen) をもつ巨大ケージ型の Au<sup>I</sup><sub>72</sub>Cd<sup>II</sup><sub>40</sub>Na<sup>I</sup><sub>4</sub> 116 核錯体、[Au<sub>6</sub>Cd<sub>3</sub>(tdme)<sub>2</sub>(D-pen)<sub>6</sub>]<sub>12</sub>Cd<sub>4</sub>Na<sub>4</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>12</sub>、の結晶を硝酸コバルト(II)水溶液に浸すと、単結晶性を保持したまま、Au<sup>I</sup><sub>72</sub>Co<sup>II</sup><sub>44</sub> 116 核錯体、[Au<sub>6</sub>Co<sub>3</sub>(tdme)<sub>2</sub>(D-pen)<sub>6</sub>]<sub>12</sub>Co<sub>8</sub>]<sup>16+</sup>、に変換されることが分かった。さらに、この単結晶変換過程における X 線構造解析を逐次行ったところ、結晶内のカドミウム(II)イオンが段階的にコバルト(II)イオンに置換される様子を明らかにした。

(2) 三脚型金(I)三核錯体、[Au<sub>3</sub>(tdme)(D-Hpen)<sub>3</sub>]<sub>12</sub> に銀(I)イオンと銅(II)イオンを反応させると、Au<sup>I</sup><sub>6</sub>Ag<sup>I</sup><sub>3</sub>Cu<sup>II</sup><sub>3</sub> 12 核錯体、[Au<sub>6</sub>Ag<sub>3</sub>Cu<sub>3</sub>(tdme)<sub>2</sub>(D-pen)<sub>6</sub>](CF<sub>3</sub>COO)<sub>3</sub>、が生成した。この結晶中には、単位格子あたり 272 個の Au<sup>I</sup><sub>6</sub>Ag<sup>I</sup><sub>3</sub>Cu<sup>II</sup><sub>3</sub> 12 核錯体が含まれており、このイオン結晶は巨大な結晶格子をもつメソ多孔構造をもつことを見出した。さらに、この結晶は、カチオン性フレームワークを保持したまま、非常に素早く、無機アニオン、有機アニオン、錯体アニオンとアニオン交換することを見出した。



(3) 2-アミノエタンチオレート (aet) をもつ Ag<sup>I</sup><sub>3</sub>Rh<sup>III</sup><sub>2</sub> 五核錯体、[Ag<sub>3</sub>Rh<sub>2</sub>(aet)<sub>6</sub>]<sup>3+</sup>、のラセミ体 (ΔΔ/ΛΛ) を酒石酸イオンのラセミ体 (RR/SS) と結晶化させると、一方のエナンチオマー同士が組み合わさった光学活性なイオン結晶 (ΔΔ-SS/ΛΛ-RR) が得られることを見出した。一方で、酒石酸イオンの代わりにリンゴ酸イオン(R/S)を用いると、酒石酸イオンとは異なる組み合わせの自然分晶挙動を示した (ΔΔ-R/ΛΛ-S)。

(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>) にコバルト(II)を反応させると、四核錯体がコバルト(II)二核ユニット ({Co<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を得られた。このカチオン性三次元ネットワーク錯体は、水素発生触媒能を示す一方で、臭化物イオンを対イオンとして用いると、酸素発生触媒能も示すことを見出した。

## 参考文献

- (1) Takeda H.; Kojima T.; Yoshinari N.; Konno, T. *Chem. Sci.*, **2021**, *12*, 11045-11055.
- (2) Fukuda, Y.; Yoshinari, N.; Yamagami, K.; Konno, T. *Chem. Commun.*, **2021**, *57*, 5386-5389.



# 物性物理化学研究室

中澤 康浩 (教授), 坏 広樹 (准教授), 山下 智史 (助教)

## 主な研究テーマ

1. 分子性超伝導体の物性開発と物性解明
2. 金属錯体、分子性電荷移動塩の基底状態の解明
3. 極微単結晶試料の熱伝導特性の解明
4.  $\pi$  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
5. 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

## 研究活動概要

1. 分子性超伝導体である  $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Br の部分重水素置換塩  $\kappa$ -(d[n,n]-BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Br を使って Mott 境界における電子相関の効果を熱容量測定によって調べた(図 1)。ドナー分子である BEDT-TTF の両端エチレン基を部分的に重水素置換することで化学的な圧力を制御することで生じる化学圧力によって誘引されるエントロピー変化を系統的に調べることができる。相境界近傍に位置する 75%置換体の電子熱容量係数  $\gamma$  は磁場に対して超伝導の抑制に基づく回復と磁場誘起絶縁化による抑制という二つの機構が拮抗した挙動を示した。この挙動は Hubbard-gap の中での状態密度を mid-gap state として捉えることで理解できる。最低温から 50K までのエントロピーの置換量依存性は 50%置換体、75%置換体で顕著に増大する。バルクの超伝導相である 0%置換体、25%置換体、さらに反強磁性体である 100%置換体や Br を Cl に置換した物質と比較し、相境界付近の物質のエントロピーは 40K 付近でも約 10 JK<sup>-1</sup>mol<sup>-1</sup>程度の大きな値になる。その差は、電子相図上での相転移線の傾きを決めている電子エントロピーの差より大きく、相転移線近傍での格子のソフト化が生じている事を示唆している。その変化は超音波を用いた音速測定の結果と矛盾なく理解できることが明らかになった。
2. 二量体の三角格子構造によりスピン液体状態を形成する電荷移動塩についてその基底状態の量子相転移について議論した。スピン液体物質の、フラストレーションが抑制され超伝導や反強磁性になるケース、加圧により三角格子を保ったままスピンの局在したスピン液体状態から伝導性をもつ金属に変化するケースを対比検討し、その熱力学的な現象理解を進めた。後者の場合には、電荷の自由度におけるギャップの形成に伴う電子熱容量係数の変化が観測された。一方、構造的な変化に伴う基底状態の変化は 1 次転移に特徴的な相分離が有限温度の高い領域まで存在する。
3. 極微単結晶試料を用いた高感度の熱伝導測定装置の開発を行った。温度領域を低温から室温まで連続して計測するため低温の極微チップ型温度計に熱電対をとりつけ両センサーを磁場下で温度校正したセルを作成した。Cu<sup>2+</sup>が二次元層状に配列した低次元集積型金属錯体の磁場下、熱伝導を広い温度領域で測定することに成功した。

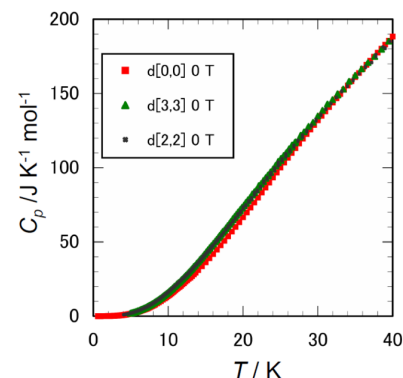


図 1. 微小単結晶を用いた磁場下熱伝導度測定システム

## 参考文献

- (1) Imajo S. *et al.*, *Phys. Rev. B* **2021**, *103*, L060508, 1-5.
- (2) Matsumura Y. *et al.* *Crystals* **2022** *12*, 2, 1-12.

# 表面化学研究室

赤井 恵 (教授), 加藤 浩之 (准教授), 渡部 誠也 (助教)

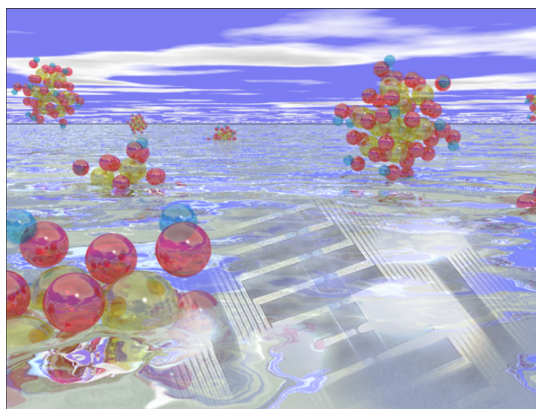
## 主な研究テーマ

1. 金属表面におけるイオニクス応答ダイナミクスの解明
2. 導電性高分子ワイヤのイオン誘導による伝導性制御
3. プロトン移動機構を応用した分子機能発現

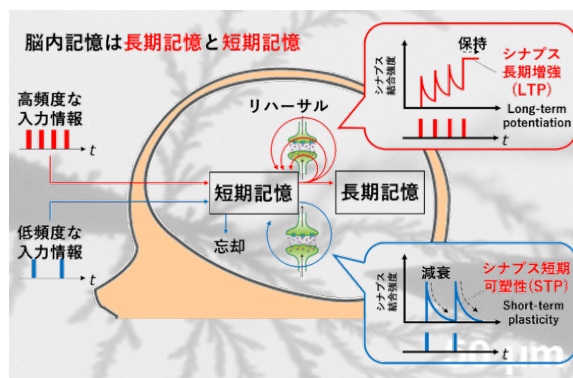
## 研究活動概要

我々の研究室では、原子、分子のナノ界面における動的な相互作用ダイナミクスを表面界面研究の手法によって調査し、その原理機構を理解する研究を行っている。特に神経細胞を模したニューロモルフィック機能や生体が行っている仕組みを分子が持つ揺らぎによって再現し、生体そのものの仕組みの謎に近づくことを目的としている。本年は以下の研究を行なった。

溶液内の電気化学電流がリザーバ計算の能力を示すことを世界で初めて明らかにした(1)。リザーバ計算とは脳の仕組みに倣った情報の変換と選択を可能にする仕組みである。我々は高い酸化還元反応を持つ酸性分子水溶液および、蒸留水の中に発生する端子間の電気化学電流を多数同時計測し、溶液内の電極表面に発生する化学反応と電氣的過渡応答信号が、高度なニューラルネットワーク計算に必要な非線形問題を解決する能力を持つことを解明した。これにより、イオンを含む溶液素材が、安全で安価な人工知能素子に利用できる可能性を示した。



またニューロンのように樹状に成長する導電性高分子ワイヤーにおいて、表面におけるイオン濃度によって伝導度が変化し、シナプスのような情報伝達効率の可塑性を再現することに成功した(2)。高分子ワイヤーは溶液内の電位を変化させドーピングと脱ドーピングをコントロールすることで、長期記憶と短期記憶の使い分けが可能になった。また、空間に配線されたワイヤーが形状を変えずに伝導度可変であることが示され、3次元構造における学習の可能性も示唆された。



## 参考文献

- (1) Kan S.; Asai T.; Nakajima K.; and Akai-Kasaya M. *Advanced Science*, **2021**, *9*, 2104076.
- (2) Hagiwara N.; Sekizaki S.; Kuwahara Y.; Asai T.; and Akai-Kasaya M. *Polymers*, **2021**, *13*, 312-322.

# 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

## 研究活動概要

自動車排ガス浄化触媒は、貴金属を多く使用しており、それらの削減もしくは代替が課題となっている。それらの研究の一つとして Pd クラスタに SMSI 効果により生じた Mn がドーパされた Pd@Mn-CaO コアシェル構造が非常に高い脱硝活性を発現することが明らかとなった。そこで、第一原理計算により CaO(111)面と Mn ドープした CaO(111)面を比較検討したところ、Mn 原子が存在することにより NO 二量体が表面上に生成しやすくなるとともに、NNO を生成する活性化障壁が著しく低下することが明らかとなった。この結果は、Mn の取り得る複数の電荷状態が NO 分子との相互作用過程に大きく影響していることが理論計算から示唆された。

この様な、異種原子のヘテロ接合を利用した触媒反応をこのほかにもいくつか理論的に検証しており、ヘテロ接合界面の重要性を明らかにしている。

また、図 2 に示すような触媒表面のモデル化に使われるスラブモデルに対するスラブの層厚の妥当性を検証する方法として線形応答関数を用いた手法を提案し、線形応答関数を用いたモデル構造の妥当性の検証方法を提案した。

## 参考文献

- (1) Hosokawa, S.; Oshino, Y.; Tanabe, T.; Koga, H.; Beppu, K.; Asakura, H.; Teramura, K.; Motohashi, T.; Okumura, M.; Tanaka, T.; *ACS Catal.* **2021**, *11*, 7996-8003.
- (2) Maruyama, T.; Ohnari, J.; Tada, K.; Hinuma, Y.; Kawakami, T.; Yamanaka, S.; Okumura, M.; *Chem. Lett.* **2021**, *50*, 1801-1805.

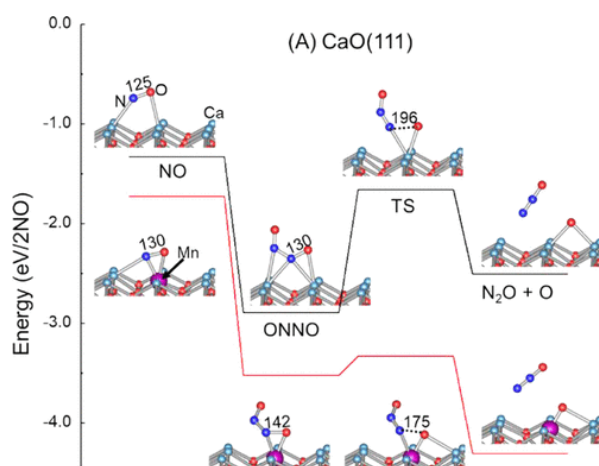


図 1 CaO(111)と Mn 添加 CaO(111)表面の NNO 生成エネルギープロファイル

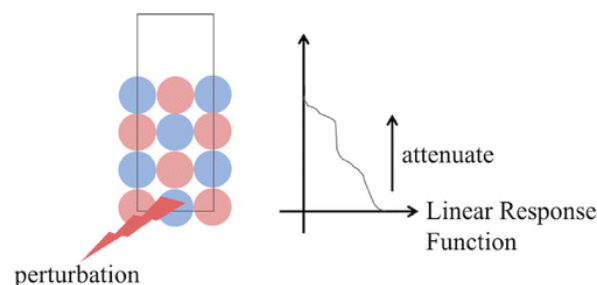


図 2 酸化物スラブモデルに対する線形応答関数

# 反応物理化学研究室

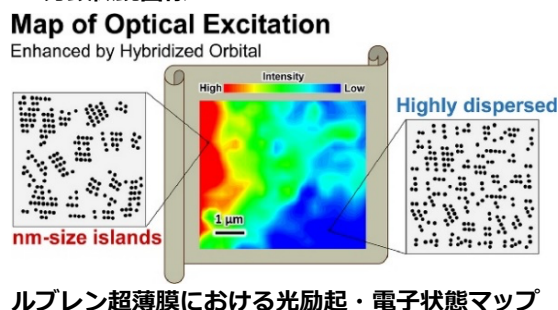
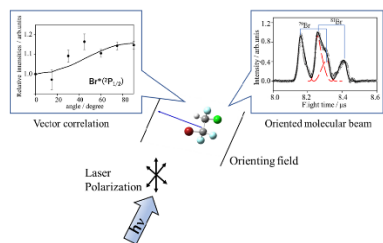
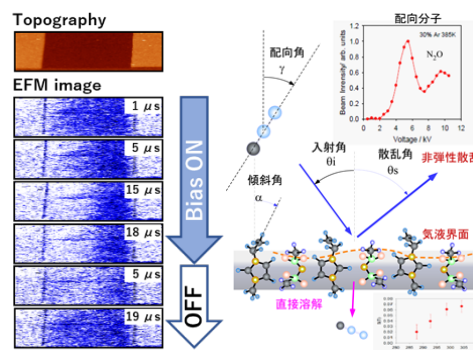
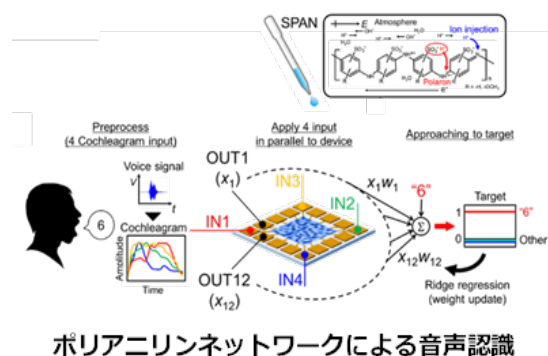
松本 卓也 (教授), 大山 浩 (准教授), 蔡 徳七 (講師), 山田 剛司 (助教)

## 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. 気-液界面衝突立体ダイナミクスの解明
4. 分子配向制御による反応分岐の発現機構の解明
5. 有機単分子膜の構造・光物性・電子状態ダイナミクスの相関解明

## 研究活動概要

1. ポリアニリン分子を用いた非線形ネットワークにより音声認識に成功した。
2. 時間分解静電気力顕微鏡を PEDOT/PSS 薄膜に適用し、不均一な電荷分布の時間変化画像の取得に成功した。
3. 装置開発を終え、配向 N<sub>2</sub>O 分子のイオン液体界面立体ダイナミクス研究を開始した。
4. 競争的な反応生成物の反応分岐の発現機構を分子の配向制御により解明した。
5. ルブレイン超薄膜の電子状態マップを取得し、構造・光励起電子状態の相関を解明した。



## 参考文献

- (1) Usami, Y.; van de Ven, B.; Mathew, D. G.; Chen, T.; Kotooka, T.; Kawashima, Y.; Tanaka, Y.; Otsuka, Y.; Ohyama, H.; Tamukoh, H.; Tanaka, H.\*; van der Wiel, W. G.\*; Takuya Matsumoto, T.\* *Advanced Materials*, **2021**, *33*, 2102688.
- (2) Che, D.-C.; Kawamata, H.; Kasai, T.; Lin, K.-C., *Phys.Chem.Chem.Phys.*, **2022**, *24*, 5914-5920.



# 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. 酸素ガスセンサータンパク質の機能発現機構解明

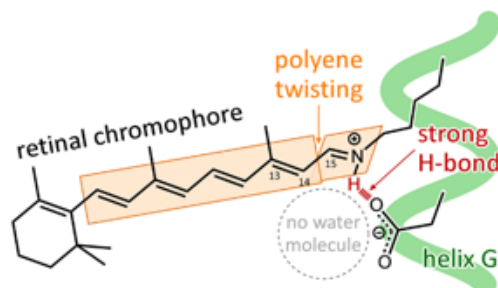
FixLは、ヘムを酸素結合部位として含む、酸素依存的なリン酸化酵素である。私たちは、時間分解共鳴ラマン分光法を用いて、酸素分子の脱離に伴うタンパク質の構造ダイナミクスを観測した。野生型と変異体の結果との比較に基づき、タンパク質構造変化を部位特異的に調べた結果、酸素センサードメインとリン酸化酵素ドメインが互いに連動することによって構造変化を効率的に伝えていることが明らかになった。

### 2. 新規光受容タンパク質の反応中間体構造解析

ヘリオロドプシンは、発色団としてレチナールを含む、レチナールタンパク質の一ファミリーである。従来のロドプシンと比べ、膜への配向が逆である、アミノ酸配列の相同性が低い(15%以下)などの特徴がある。その生理的機能は未知であるが、長寿命の中間体が存在することから、光センサーとして機能すると考えられている。私たちは、ヘリオロドプシンの機能解明に向けて、光反応中間体の発色団構造を調べた。その結果、アミノ酸配列が大きく異なるにもかかわらず、発色団構造の変遷は従来のレチナールタンパク質とよく似ていることが明らかになった。

### 3. 光駆動イオン輸送タンパク質の機能発現機構解明

シゾロドプシンは2020年に発見された、新規レチナールタンパク質ファミリーである。その多くは、プロトン輸送活性を持つが、輸送方向が従来の光駆動プロトン輸送タンパク質とは逆であることから注目を集めている。私たちは、4種類のシゾロドプシンを系統的に調べ、その発色団構造を共鳴ラマン分光法によって決定した。従来の光駆動プロトン輸送タンパク質では、発色団はタンパク質内部の水分子と水素結合していることが一般的な特徴である。しかし、シゾロドプシンでは、発色団は水分子ではなく、アミノ酸側鎖と強い水素結合しており、ポリエン鎖のねじれがこれを助けていることが明らかになった。この違いと、プロトン輸送方向の反転との関係について考察した。



## 参考文献

- (1) Yamawaki, T.; Mizuno, M.; Ishikawa, H.; Takemura, K.; Kitao, A.; Shiro, Y.; Mizutani, Y. *J. Phys. Chem. B*, **2021**, *125*, 6847-6856.
- (2) Urui, T.; Mizuno, M.; Otomo, A.; Kandori, H.; Mizutani, Y. *J. Phys. Chem. B*, **2021**, *125*, 7155-7162.

# 構造有機化学研究室

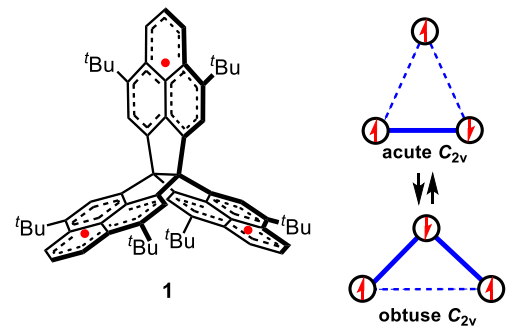
久保 孝史 (教授), 平尾 泰一 (講師), 西内 智彦 (助教)

## 主な研究テーマ

1. 空間を通じて相互作用するトリラジカル種の電子構造の解明
2. 基質選択的な還元作用を示す有機ヒドリド試薬の開発
3. 嵩高い芳香環を有する安定な炭化水素ラジカル合成と物性の解明

## 研究活動概要

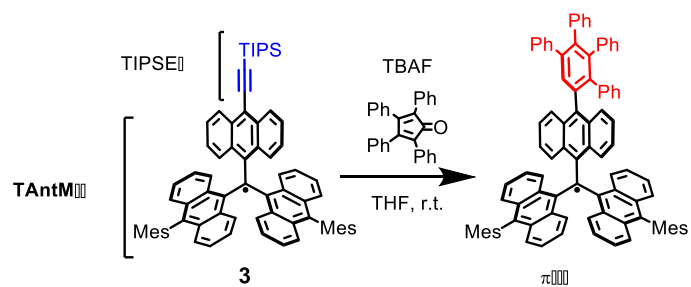
1. 分子内で3つの不対電子が空間を通じて相互作用する化合物 **1** は形式的に  $D_{3h}$  対称性を有するが、実際には Jahn-Teller 効果により対称性が低下し、2つの  $C_{2v}$  構造へと変化することを実験的に明らかにした。興味深いことに、この2つの歪んだ構造は、可逆的に相互変換可能であることも明らかにした。



2. ヒドリド性を有する C-H 結合を立体的に嵩高い置換基で被覆・保護した新規ジヒドロピリジン合成した。このジヒドロピリジンはアルデヒドおよびイミンを対象として、反応中心となる炭素原子周りの立体環境を認識した選択還元を実現した。また反応後の回収効率と再利用性が非常に優れていることがわかった。



3. 嵩高いアントラセン骨格を三つ有する **TAntM** ラジカルの高い安定性に着目し、トリイソプロピルエチニル (TIPSE) 基を導入した新たな **TAntM** ラジカル **3** を合成した。TIPSE 基を導入しても **TAntM** ラジカル **3** は高い安定性を保持していた。



シリル基を脱保護することでエチニル部位に Diels-Alder 反応を室温という温和な条件で進行させ、通常は不安定な炭化水素ラジカル種の  $\pi$  拡張反応を実現した。

(1) Kodama, T.; Aoba, M.; Hirao, Y.; Rivero, S. M.; Casado, J.; Kubo, T. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202200688.

(2) Nishiuchi, T.; Ishii, D.; Aibara, S.; Sato, H.; Kubo, T. *Chem. Commun.* **2022**, *58*, 3306-3309.

# 物性有機化学研究室

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を基盤とした化学反応の制御と応用。
4. 有機りん光材料・発光性刺激応答材料の開発。

## 研究活動概要

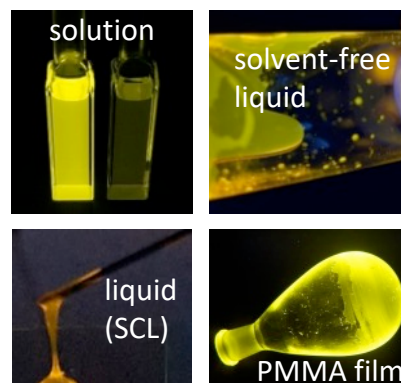
1. 一般的な有機化合物は、Kasha 則に則り最低励起状態からの発光のみが通常紫外～可視光領域に観測される。我々は、単一の有機分子で希土類錯体に匹敵するような多様な発光特性を実現することを目指している。実現のための鍵化合物として反芳香族化合物に注目している、これまでに、 $20\pi$ 反芳香族化合物であるイソフロリンが、多重発光、および近赤外発光を示すことを明らかにしている。今年度は、反芳香族性と反カシャ発光特性の相関の解明を目的として、種々のイソフロリンの発光特性を評価したところ、反芳香族性を示すものはすべて反カシャ発光特性を示したのに対し、反芳香族性を示さない分子は、発光特性を示さなかった。このことから、反カシャ発光特性が発光特性に重要であることが示唆された。

2. 過去に合成した剛直な構造を有する亜鉛ポルフィリン対面型二量体が発光新規ゲスト包接挙動の調査を行った。結果、通常では亜鉛ポルフィリンに対して配位を示さない置換ピラジン誘導体が、軸配位を駆動力として、二量体内に強く包接されることを明らかにした。これは、二量体の剛直な構造に由来すると考えている。ピラジン誘導体は香気成分の一つであることから、今後、この二量体を用いたセンシングなどへの応用を検討している。

3. 金表面 (金ナノ電極) への分子の架橋確率を支配する因子について、錯体化学的な立場から評価した。具体的には、様々な配位子を有する金エチニル錯体を系統的に合成し、ブレイクジャンクション法による単分子電導度計測を行った。その結果、架橋確率は配位子の電子効果よりも立体効果の影響を顕著に受けることが明らかになり、架橋確率の制御に有用な知見を得た。

4. 溶液中、ポリマーマトリクス中、無溶媒液体状態など様々な状態で、高効率な室温りん光を示す有機材料の開発に成功した。特に、結晶状態では光らず、液体状態でだけりん光を示す有機分子を見出した。これは従来の常識と真逆の現象であり、新しいりん光材料の設計指針と可能性を示すことができた。

Organic RTP in various states



## 参考文献

- (1) Yamashita, K.; Furutani, K.; Ogawa, T. *Asian J. Org. Chem.* **2021**, *10*, 1192-1197.
- (2) Komura, M.; Ogawa, T.; Tani, Y. *Chem. Sci.*, **2021**, *12*, 14363-14368.



# 天然物有機化学研究室

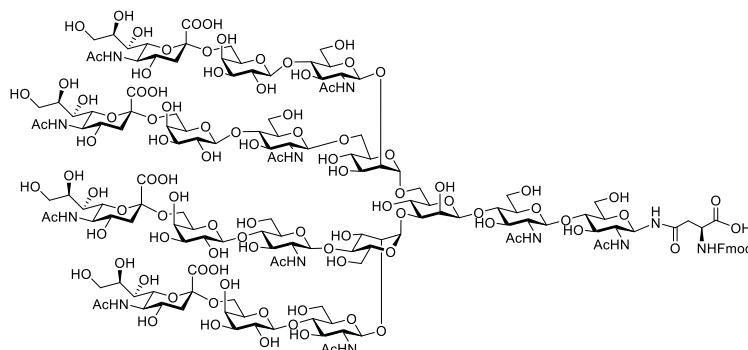
深瀬 浩一 (教授), 樺山 一哉 (准教授), 下山 敦史 (助教), 真鍋 良幸 (助教)

## 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

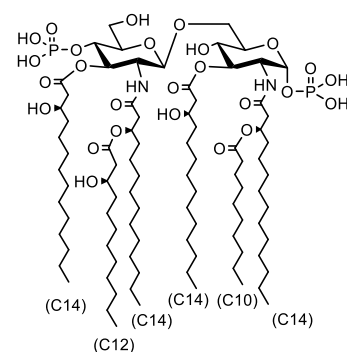
## 研究活動概要

1. 糖鎖修飾は最も一般的なタンパク質の翻訳後修飾である。アスパラギン結合型糖鎖 (*N*-グリカン) は多様な構造を持ち、その構造に基づいて様々な機能を持つ。我々は、免疫制御において重要な機能を持つシ



アル酸を4つ有する、4分枝 *N*-グリカンの化学合成を世界で初めて成功した<sup>1)</sup>。これらの合成糖鎖を用いた機能解析についても検討を進めている。

2. グラム陰性菌外膜成分リポ多糖 (LPS) は、代表的な免疫活性因子であり、多糖が糖脂質リポド A に結合した構造をとっている。共生菌成分は宿主の免疫系を適度に制御するというアイデアのもと、腸管粘膜免疫制御組織パイエル板共生菌 *Alcaligenes faecalis* に着目し、その LPS 化学構造の同定、リポド A の化学合成、機能解析を実施したところ、リポド A 部が *A. faecalis* LPS の活性中心であり、粘膜免疫制御を担っていることを明らかにした。さらに粘膜・全身免疫を効果的に高め、注射型だけでなく粘膜ワクチンにも適用可能であるとともに、副反応が少なく安全性にも優れていることを明らかにした<sup>2)</sup>。



## 参考文献

- (1) Shirakawa, A.; Manabe, Y.; Marchetti, R.; Yano, K.; Masui, S.; Silipo, A.; Molinaro, A.; Fukase, K. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 24686-24693.
- (2) Shimoyama, A.; Lorenzo, F.D.; Yamaura, H.; Mizote, K.; Palmigiano, A.; Pither, M.D.; Speciale, I.; Uto, T.; Masui, S.; Sturiale, L.; Garozzo, D.; Hosomi, K.; Shibata, N.; Kabayama, K.; Fujimoto, Y.; Silipo, A.; Kunisawa, J.; Kiyono, H.; Molinaro, A.; Fukase, K. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 10023-10031.

# 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

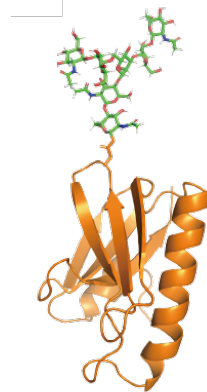
1. 糖タンパク質の化学合成
2. 糖鎖の合成
3. 糖鎖の生合成・分解の分子機構の解明

## 研究活動概要

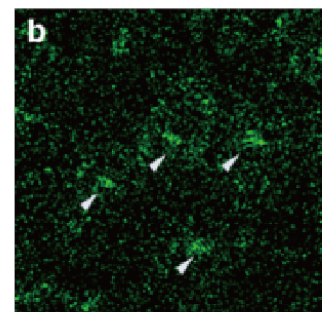
タンパク質の糖鎖付加は重要な翻訳後修飾であり、糖鎖はタンパク質の生理活性の制御や安定性の向上に重要である。糖鎖は小胞体における糖タンパク質品質管理機構に参与しており、種々のシャペロンと相互作用しながら糖タンパク質のフォールディングに貢献している。しかし、なぜタンパク質ごとに糖鎖パターンが異なるのか、また糖鎖が糖タンパク質の輸送や成熟過程にどのように影響しているのかなど、未だ明らかではない。我々は、合成した均一な構造の糖タンパク質を小胞体 (ER) やゴルジ体へと導入することで、糖鎖の構造変化や機能を調べることができると考えた。

本研究では、生細胞の特定のオルガネラへと糖タンパク質を導入するために、人工的に複合型糖鎖を付加したコレラトキシン B サブユニット (CTB) を合成した。コレラトキシン (CT) は *V.Cholerae* から産生されるタンパク質毒素であり、毒性を有する A サブユニットと、細胞への侵入に重要な CTB から構成されている。CT は細胞膜表層からエンドサイトーシスによって細胞内へと侵入し、その後ゴルジ体や ER へと輸送される。この活性を利用し、人工的に糖鎖を付加した CTB を ER やゴルジ体へと選択的に輸送できると考えた。天然の CT は糖鎖をもたないが、X 線結晶構造解析の結果を参考に、細胞内への移行を阻害しない N 末端側に人工的に導入した。120 アミノ酸残基ほどからなる全長を 5 つのセグメントに分割し、それぞれを固相合成法によって調製した。そしてセグメント同士を一般的なペプチド連結反応によってつなげることで全長糖ペプチドを得た。さらに段階透析を用いた条件でフォールディングを検討したところ、単量体として糖鎖化 CTB **1** を得た。

得られた糖鎖化 CTB **1** を使って細胞への導入実験を検討した。C 末端に導入した発光タグを用いて細胞への取り込みを観察したところ、時間経過とともに細胞膜上からゴルジ体や ER へと輸送されることを確認した。また輸送効率を定量したところ、糖鎖の有無などが輸送に影響することも明らかとなった。本研究により、糖鎖化 CTB は単量体でも ER やゴルジ体へと輸送されることが明らかとなり、導入する糖鎖構造を変えることで生合成経路における糖鎖機能を今後さらに調べていくことができる。



糖鎖化 CTB **1**



ゴルジ体への輸送を追跡したイメージング

# 生体分子化学研究室

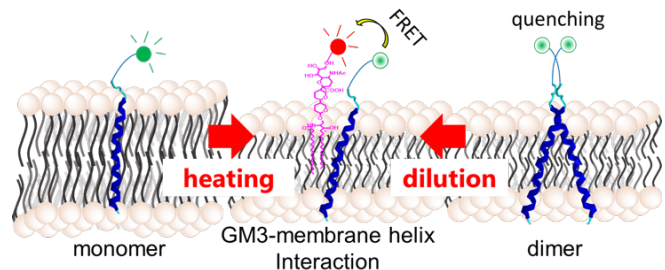
村田 道雄 (教授), 花島 慎弥 (准教授), 梅川 雄一 (助教)

## 主な研究テーマ

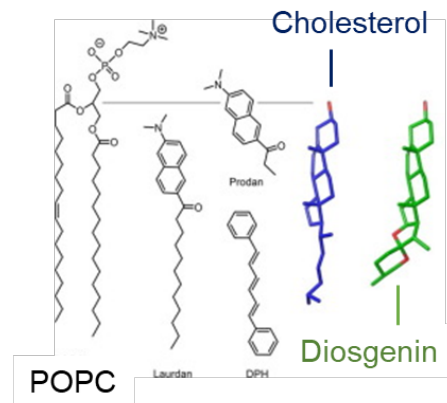
1. 膜脂質と分子集合体の構造と機能
2. 脂質とタンパク質の相互作用の分子機構
3. 生体分子の化学合成と作用機構研究

## 研究活動概要

細胞膜に存在するガングリオシド GM3 は、上皮成長因子受容体 (EGFR) の自己リン酸化を防ぐことにより、がん細胞の増殖や悪性を抑制する。われわれは蛍光基 NBD を有する EGFR の疎水性の膜貫通部位を合成して GM3 との相互作用を、NBD の自己消光と蛍光 GM3 との FRET を用いて調べた。その結果、GM3 は EGFR の膜貫通ドメインと相互作用することで単量体を安定化し、活性型の二量体形成を防ぐことで EGFR の活性化を抑えることが示唆された。糖脂質を介した一回膜貫通タンパク質の新しい活性制御機構の存在を示唆している。



ヤマノイモ科の植物に含まれるステロールであるジオスゲニン (DGN) は、さまざまな薬理作用を有するなど注目を集めている。DGN はスフィンゴミエリンと脂質ドメインを形成する哺乳動物のステロールであるコレステロールと同一の骨格を有する一方、側鎖の構造は大きく異なる。DSN とコレステロールのリン脂質に対する相互作用を固体 NMR で調べた結果、30 mol%以下の濃度領域ではコレステロールと同程度の相互作用が観測された。脂質相互作用におけるコレステロールの構造的な特性の一端を明らかにした。



## 参考文献

- (1) Nakano, M.; Hanashima, S.; Hara, T.; Kabayama, K.; Asahina, Y.; Hojo, H.; Komura, N.; Ando, H.; Nyholm, T. K. M.; Slotte, J. P.; Murata, M. *Biochim. Biophys. Acta Biomembr.* **2021**, *1863*, 183623.
- (2) Ondevilla, J. C.; Hanashima, S.; Mukogawa, A.; Umegawa, Y.; Murata, M. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2021**, *36*, 127816.

# 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. 薬理作用のある金属錯体の合成と性質
3. 小分子活性化能を有する金属錯体の合成と性質

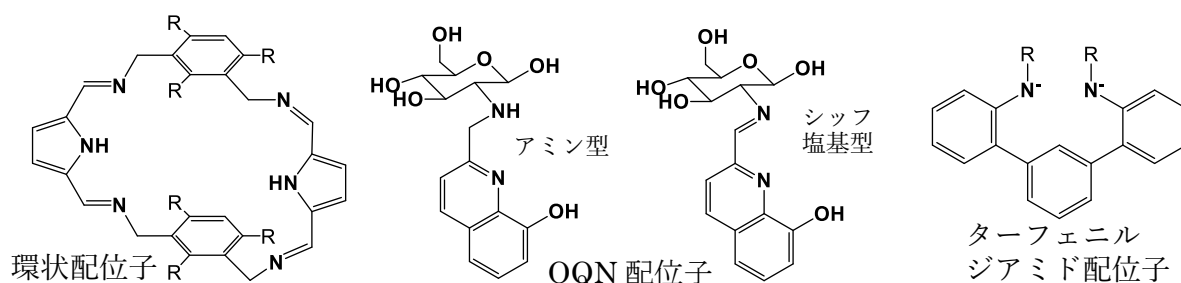
## 研究活動概要

生体内に存在する各種の金属元素の機能とその原理を追究し、蛋白質の活性部位を模倣した金属錯体の合成と性質の検討も行う。このような生体機能を支える金属が関連した新奇の触媒反応の開発や薬学的な応用などに繋がる基礎研究も行っている。

マルチ銅酵素は複数の Type I, II, III の銅活性部位を持つ蛋白質であり、基質の酸化に伴い酸素分子の4電子還元を行う。まずその一種であるヨウ化物イオン酸化酵素の反応性に関する知見を得た。つぎに Type III 銅中心の活性部位モデルとして、二つのビス(イミノ)ピロール部位を持つ環状配位子(下図)を用いた新規の二核銅錯体を合成し、二核金属中心間の距離を蛋白質中と同様に制御することにより、酸素や硫黄などのカルコゲン付加体が生成することを確認した。

また、抗がん活性のあるアミノ糖含有配位子(下図)を用いた遷移金属錯体の性質を明らかにした。アミン型の OQN 配位子は三座にも関わらず糖の効果により生理的 pH の水溶液中で銅(II)イオンと強固に錯形成することが分かった( $\log\beta \gg 15$ )。同様にシッフ塩基型の OQN 配位子で安定に形成した白金(II)やパラジウム(II)錯体は、生理的 pH の水溶液中では糖の効果により分刻みの変化を起こした。その生成した化学種はがん細胞で高発現する膜貫通型蛋白質の CDCP1 が下流の蛋白質との間で行うシグナル伝達を阻害する機構と深い関連を持ち、既に報告した辛子油配糖体と遷移金属イオンの反応に続き<sup>1</sup>、新奇のがん治療法に繋がる知見を得た。

さらにターフェニルジアミド配位子(下図)を用いた低原子価コバルト(I)錯体において、配位子骨格中央のベンゼン環の炭素がコバルト中心に作用した配位構造が比較的安定に形成した。そこに有機アジドを反応させたところ、配位子内の C-H 結合切断のみに留まらず、C-C 結合や C-N 結合形成が進行することなどを新たに見出した。コバルトの生体機能はビタミン B<sub>12</sub> で良く知られているが、更なる機能が期待される。



:

(1) Alba, L. D. V.; Hatanaka, T.; Franco, F. C. Jr.; Nojiri, M.; Noel, M. G.; Funahashi, Y. *Dalton Trans.* **2021**, 50, 8292-8296 (Outside front cover).

# 熱・エントロピー科学研究センター

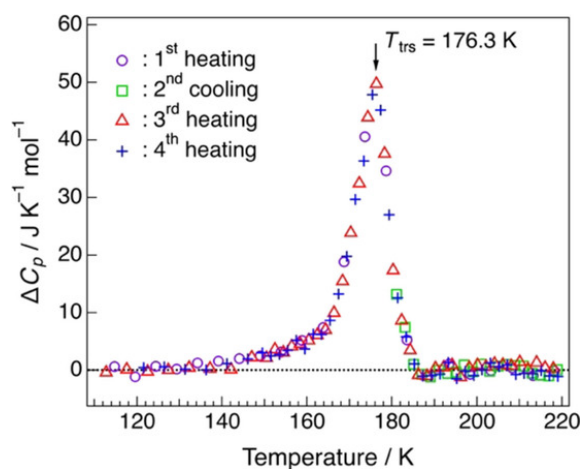
中野 元裕 (教授), 宮崎 裕司 (准教授), 高城 大輔 (助教)

## 主な研究テーマ

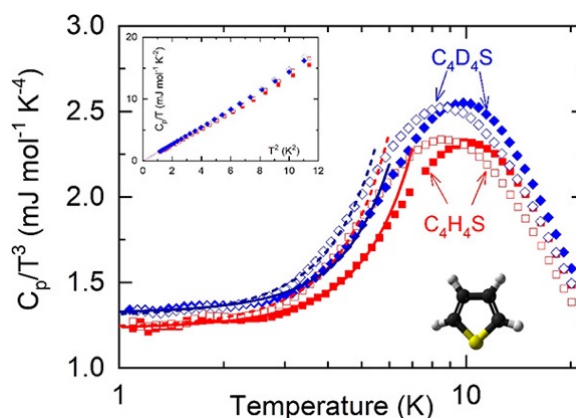
1. 固体表面や固液界面で吸着によって形成される単分子膜の熱力学的挙動と構造、ダイナミクスの研究
2. 水溶液中における電解質および非電解質の水和状態に関する熱力学的研究
3. 分子磁性体の磁氣的挙動、相転移とスピン間相互作用の研究
4. 生体分子や高分子のダイナミクス、水との相互作用に関する熱力学的研究
5. 生命現象の熱力学的アプローチ
6. 化学結合の熱化学的研究

## 研究活動概要

上記研究テーマにつき、実験熱力学的研究を行った。個々の成果については、**阪大化学熱学レポート No. 42 (2021)** で詳細に報告している。



[Rh(3,6-DBDiox-4-NO<sub>2</sub>)(CO)]<sub>∞</sub> 錯体の原子価互変異性による電荷移動相転移



チオフェン結晶の低エネルギー励起による過剰熱容量

## 参考文献

- (1) Water-Oriented Magnetic Anisotropy Transition. Su, S.-Q.; Wu, S.-Q.; Hagihala, M.; Miao, P.; Tan, Z.; Torii, S.; Kamiyama, T.; Xiao, T.; Wang, Z.; Ouyang, Z.; Miyazaki, Y.; Nakano, M.; Nakanishi, T.; Li, J.-Q.; Kanegawa, S.; Sato, O. *Nat. Commun.* **2021**, *12*, 2738, 1–9.
- (2) Low-Temperature Heat Capacity Anomalies in Ordered and Disordered Phases of Normal and Deuterated Thiophene. Miyazaki, Y.; Nakano, M.; Krivchikov, A. I.; Koroyuk, O. A.; Gebbia, J. F.; Cazorla, C.; Tamarit, J. Ll. *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, *12*(8), 2112–2117.



# 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)

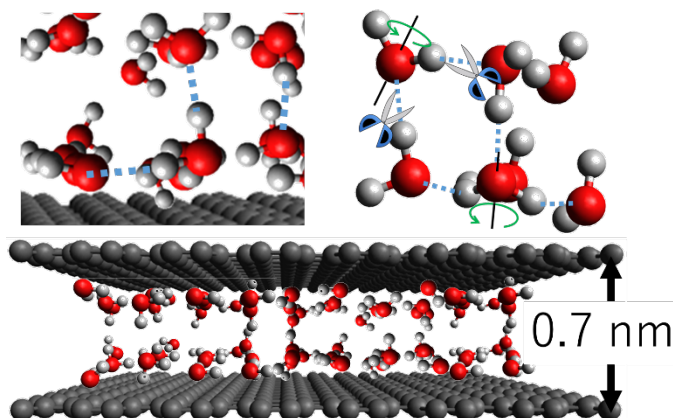
## 主な研究テーマ

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

### (1) 擬 2 次元的な疎水性ナノ空間に閉じ込められた水分子の動的挙動

擬 2 次元的な疎水性ナノ空間に閉じ込められた水は、バルクとは異なる挙動を示すことから、その動的挙動についても興味もたれている。本研究では、活性炭素繊維 (Activated carbon fiber; ACF) のスリット状ナノ細孔に閉じ込められた水分子の動態を  $^2\text{H}$  NMR により調べた。重水が ACF 細孔内で流体として振る舞う温度範囲 ( $T > 200 \text{ K}$ ) おいて、スピン格子緩和時間 ( $T_1$ ) と吸収線幅の温度変化から再配向運動の活性化エネルギーとして  $26 \text{ kJmol}^{-1}$  の値が得られた。これは細孔内の重水が再配向運動をする際に、2 本の水素結合が切断されることを示唆している。バルクでは水分子 1 個当たり 3.5 個の水素結合が形成されることから、ACF 細孔内では水素結合の形成が抑制されることがわかった。



### (2) 多孔性配位高分子 ZIF-8 のベンゼン吸着に対する配位子置換基効果

イミダゾール誘導体アニオン ( $\text{XIm}^-$ ) を架橋部にもつ多孔性配位高分子は Zeolitic Imidazolate Frameworks (ZIFs) と呼ばれる。中でも、2-メチルイミダゾールアニオン ( $\text{CH}_3\text{Im}^-$ ) と  $\text{Zn}^{2+}$  で構成される ZIF-8 は、直径  $11.4 \text{ \AA}$  のマイクロ孔が 8 つの 6 員環開口部 (直径  $3.4 \text{ \AA}$ ) によって 3 次元的に連結されたソーダライト構造をもつ。本研究では、嵩高い分子の吸着挙動に対し、架橋部の局所構造が及ぼす影響を明らかにするために、2 位に異なる置換基をもつ X-ZIF-8 (X=Cl, Br) を合成し、ベンゼンの吸着挙動に対する置換基効果を検討した。その結果、窒素の飽和吸着量は細孔の大きさに比例して増大するのに対し、ベンゼンでは ZIF-8 で特異的に吸着量が増大することがわかった。これは、メチル基とベンゼンとの間の親和的な相互作用の存在を示唆しており、多孔性配位高分子 ZIF-8 の架橋配位子とベンゼン分子との相互作用に顕著な置換基効果があることが明らかとなった。

## 参考文献

- (1) Ueda, T. *Acc. Mater. Surf. Res.* **2021**, 6, 1-10.
- (2) 八木 椋平, 修士論文, 大阪大学大学院理学研究科化学専攻 (2021 年 3 月)

# 同位体化学研究室

吉村 崇 (教授), 二宮 和彦 (准教授), 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. ミュー粒子を用いた新しい分析法の開発
4. 福島第一原発事故に関連した微量放射性同位元素測定による環境化学研究

## 研究活動概要

(1) 6つのレニウムが金属結合をもつクラスター錯体にピリジン型の配位子が1つ結合した種々の錯体を合成した。クラスター骨格内遷移もしくはクラスター骨格-配位子の $\pi^*$ 軌道の電荷移動遷移にもとづく発光が観測され、配位子の $\pi^*$ 軌道のエネルギーに変えることで発光特性をコントロールできることを明らかにした。

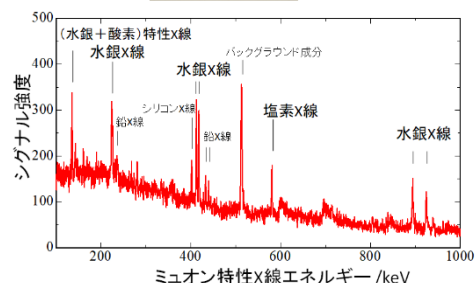
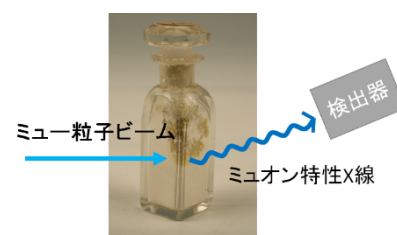
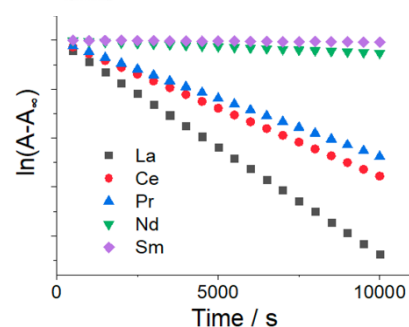
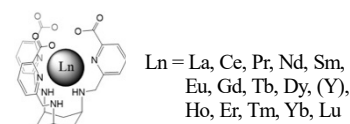
(2) トリアミノシクロヘキササン骨格にピコリン酸アームを3つ接続した新たな配位子を設計し、一連のランタノイド錯体を合成した。これらの錯体の安定度定数  $\log K$  を測定したところ、Ce~Lu までの値はおおよそ 15 程度であり、顕著な違いは見られなかった。一方、酢酸水溶液中での分解反応を追跡し、ランタノイド錯体の速度論的安定性を評価したところ、イオン半径の大きさ ( $La > Ce > Pr > Nd > Sm$ ) に従って分解反応の半減期が数分~数日まで、顕著に増加することがわかった。また、この Gd 錯体は MRI で汎用される [GdDOTA] 錯体と同程度の高い  $T_1$  緩和能を持つこともわかった。

(3) 素粒子ミュー粒子を用いた元素分析法の開発とその適用実験を進めた。具体的な例として、大阪大学に遺されている江戸時代の医師、緒方洪庵の薬箱の中にある、開栓不能な薬瓶の内容物分析を行った。ミュー粒子の打ち込み深さを制御することで、薬瓶の内部にミュー粒子を停止させ、放出された X 線を分析することで、内容物が甘汞 (塩化水銀(I)) であることを非破壊で明らかにした。

(4) 東京電力福島第一原子力発電所の事故により環境中に放出された、放射性核種の分析を行った。土壌中の微量な  $^{90}\text{Sr}$  に注目し、その深度分布と移行過程について考察を行った。

## 参考文献

- (1) Kaneda-Nakashima, K.; Zhang, Z. J.; Nagata, K.; Shirasaki, K.; Kikunaga, H.; Yamamura, T.; Ooe, K.; Watabe, T.; Toyoshima, A.; Yoshimura, T.; Shinohara, A. *Radiat. Safe. Manage.* **2021**, *20*, 29-38.
- (2) Shimada-Takaura, K.; Ninomiya, K.; Sato, A.; Ueda, N.; Tampo, M.; Umegaki, I.; Miyake, Y.; Takahashi, K. *J. Nat. Med.* **2021**, *75*, 532-539.





# 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.  $\text{Mo}_{1-x}\text{Re}_x(110)$  表面に水素を解離吸着させ、高分解能紫外光電子分光法により 2 次元フェルミ面の変化を調べ、電子-フォノン相互作用を解明した。ヘリウム散乱分光により測定されたフォノン分散における巨大 Kohn 異常が電子-空孔励起により理解できることがわかった。また、合金による 2 次元フェルミ面のチューニング (図 1) によりフォノン物性を制御できることがわかった。

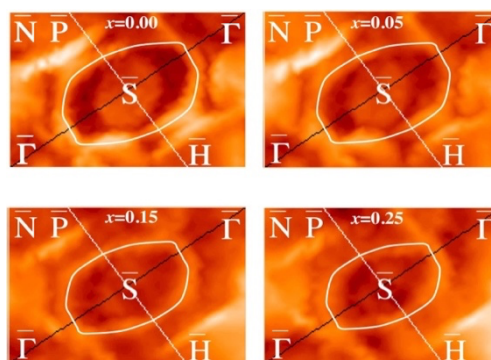


図 1. H が吸着した  $\text{Mo}_{1-x}\text{Re}_x(110)$  ( $x = 0.00, 0.05, 0.15$ , および  $0.25$ ) の 2 次元フェルミ面

2. 超高真空中において  $\text{Cu}_2\text{O}(111)$  並びに  $\text{Cu}(111)$  表面上の銅酸化物 (“8”構造および “29”構造) の 3 種類の Cu 酸化物表面を調製し、高分解能放射光 X 線光電子分光 (SR-XPS) 測定によってそれぞれの表面構造を検討した。バルク酸化物表面と極薄酸化物表面の比較も行った。図 2 に “8”構造と “29”構造の例を示す。電子状態も異なるこれら酸化物表面の塩化メチル分子との化学反応性の違いも検討し、酸化物表面の触媒能について知見を得た。

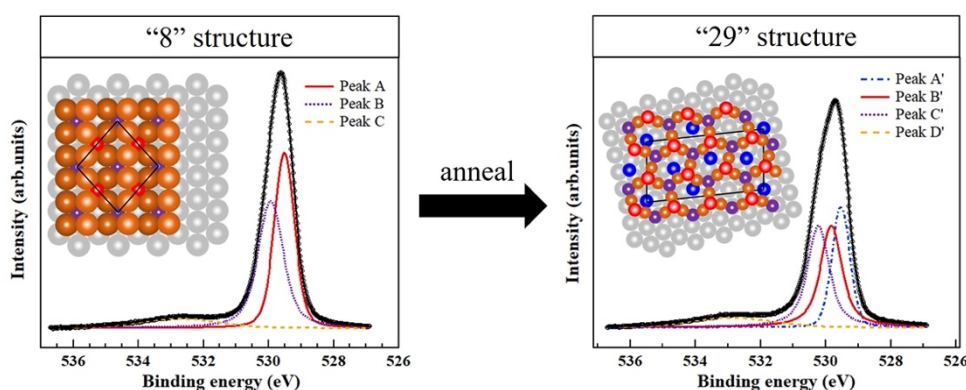


図 2. “8”構造および “29”構造

## 参考文献

- (1) Okada, M.; Rotenberg, E.; Kevan, S.D.; Schäfer, J.; Plummer, E.W. *Journal of Physics Communications* **2021**, *5*, 075008, 1-8.
- (2) Hayashida, K.; Tsuda, Y.; Yamada, T.; Yoshigoe, A.; Okada, M. *ACS Omega* **2021**, *6*, 26814-26820.

## II. 業績リスト

## 原著論文

- O-1** In Situ Fluorescence Microscope Measurements of the Phase Transfer Dynamics of Single DNA Molecular Ions with Dimethyldioctadecylammonium Chloride into Isooctane–1-Octanol mixture.  
Tsukahara, S.; Inoshita, S.; Fujiwara, T. *Solvent Extr. Res. Dev., Jpn.* **2021**, *28*, 1-10.
- O-2** Intense Chiral Signal from  $\alpha$ -Helical Poly-L-Alanine Observed in Low-Frequency Raman Optical Activity.  
Yamamoto, S.; Ishiro, S.; Kessler, J.; Bouř, P. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 26501-26509.
- O-3** Chemical Characterization of a Volatile Dubnium Compound, DbOCl<sub>3</sub>.  
Chiera, N. M.; Sato, T. K.; Eichler, R.; Tomitsuka, T.; Asai, M.; Adachi, S.; Dressler, R.; Hirose, K.; Inoue, H.; Ito, Y.; Kashihara, A.; Makii, H.; Nishio, K.; Sakama, M.; Shirai, K.; Suzuki, H.; Tokoi, K.; Watanabe, E.; Nagame, Y. *Angewandte Chemie* **2021**, *133*, 18015-18018.
- O-4** A Novel Challenge of Nondestructive Analysis on OGATA Koan's Sealed Medicine by Muonic X-ray Analysis.  
Shimada-Takaura, K.; Ninomiya, K.; Sato, A.; Ueda, N.; Tampo, Soshi M.; Takeshita, Umegaki, I.; Miyake, Y.; Takahashi, K. *Journal of Natural Medicines* **2021**, *75*, 532-539.
- O-5** Position Distribution Calculation of Annihilation Radiations and Bremsstrahlung X Rays in Water During Irradiation of Positive Muons: a Monte Carlo Simulation Study.  
Hirano, Y.; Yamamoto, S.; Kawamura, N.; Ninomiya, K. *Physica Scripta* **2021**, *96*, 025302.
- O-6** Co-Precipitation Behaviour of Single Atoms of Rutherfordium in Basic Solutions.  
Kasamatsu, Y.; Toyomura, K.; Haba, H.; Yokokita, T.; Shigekawa, Y.; Kino, A.; Yasuda, Y.; Komori, Y.; Kanaya, J.; Huang, M.; Murakami, M.; Kikunaga, H.; Watanabe, E.; Yoshimura, T.; Morita, K.; Mitsugashira, T.; Takamiya, K.; Ohtsuki, T.; Shinohara, A. *Nature Chem.* **2021**, *13*, 226-230.
- O-7** Antiparallel Coupling between a 4f System and a Photoexcited Cyclic

$\pi$  System in a Dysprosium(III) Monoporphyrinato Complex.  
Anas Santria, Naoto Ishikawa *Inorg. Chem.* **2021**, *60*(18)  
14418-14425.

- O-8** Pyrrolopyrrole Aza - dipyrin: Hydrogen - Bonded Assemblies and Slow Magnetic Relaxation of the Cobalt(II) Complex in the Solid State.  
Toshiharu Ishizaki, Hideaki Karasaki, Yuto Kage, Misaki Kamioka, Yitong Wang, Shigeki Mori, Naoto Ishikawa, Takamitsu Fukuda, Hiroyuki Furuta, Soji Shimizu *Chemistry – A European Journal* **2021**, *27*(49) 12686-12692.
- O-9** Intramolecular Magnetic Interaction in a Photogenerated Dual Angular Momentum System in a Terbium-Phthalocyaninato 1:1 Complex.  
Kazuro Kizaki, Anas Santria, Naoto Ishikawa *Inorg. Chem.* **2021** *60*(3) 2037-2044.
- O-10** Insertion of a Hydride Ion Into a Tetrasilver(I) Cluster Covered by S-donating Rhodium(III) Metalloligands.  
Fukuda, Y.; Yoshinari, N.; Konno, T. *Inorg. Chem.* **2021**, *60*, 468-475.
- O-11** Interconversion between square-planar palladium(II) and octahedral palladium(IV) centres in a sulfur-bridged trinuclear structure.  
Kouno, M.; Kuwamura, N.; Konno, T. *Chem. Commun.* **2021**, *57*, 1336-1339.
- O-12** Racemic Tartrate/Malate Anions Combine with Racemic Complex Cations to Form Optically Active Ionic Crystals.  
Uno, M.; Kojima, T.; Kuwamura, N.; Yoshinari, N.; Konno, T. *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 8358-8364.
- O-13** Transformations of empty  $\text{Cu}^{\text{I}}_4$  core to  $\text{Cu}^{\text{I}}_2\text{Cu}^{\text{II}}_2\text{O}$  and  $\text{Cu}^{\text{I}}_6\text{S}$  cores via oxide and sulfide insertions.  
Fukuda, Y.; Yoshinari, N.; Yamagami, K.; Konno, T. *Chem. Commun.* **2021**, *57*, 5386-5389.
- O-14** Intermediate snapshots of a 116-nuclear metallosupramolecular cage-of-cage in a homogeneous single-crystal-to-single-crystal transformation.  
Wahyudianto, B.; Imanishi, K.; Kojima, T.; Yoshinari, N.; Konno, T. *Chem. Commun.* **2021**, *57*, 6090-6093.

- O-15** Lanthanide Coordination Polymers through Design for Exceptional Catalytic Performances in CO<sub>2</sub> Cycloaddition Reactions.  
Sinchow, M.; Semakul, N.; Konno, T.; Rujiwatra, A. *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2021**, *9*, 8581-8591.
- O-16** Photoluminescent Ionic Solids of S-Bridged Gold(I)-Gallium(III) and Gold(I)-Indium(III) Hexanuclear Complexes.  
Itai, T.; Kuwamura, N.; Kojima, T.; Yoshinari, N.; Rujiwatra, A.; Konno, T. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2021**, *94*, 2076-2078.
- O-17** A photoactive iridium(III) complex with 3-methyl-2-phenyl pyridine and 1,1-bis(diphenylphosphino)methane: Synthesis, structural characterization and cytotoxicity in breast cancer cells.  
Leesakul, N.; Kullawanichaiyanan, K.; Mutic, S.; Guzsvany, V.; Nhugeaw, T.; Ratanaphan, A.; Saithong, S.; Konno, T.; Sirimahachai, U.; Promarak, V. *J. Coord. Chem.* **2021**, *74*, 2380-2394.
- O-18** A mesoporous ionic solid with 272 Au<sup>I</sup><sub>6</sub>Ag<sup>I</sup><sub>3</sub>Cu<sup>II</sup><sub>3</sub> complex cations in a super huge crystal lattice.  
Takeda, H.; Kojima, T.; Yoshinari, N.; Konno, T. *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 11045-11055.
- O-19** Highly Disordering Nanoporous Frameworks of Lanthanide-Dicarboxylates for Catalysis of CO<sub>2</sub> Cycloaddition with Epoxides.  
Thammakan, S.; Kuwamura, N.; Chiangraeng, N.; Nimmanpipug, P.; Konno, T.; Rujiwatra, A. *J. Solid State Chem.* **2021**, *303*, 122464-122451.
- O-20** Heterometallation of Photoluminescent Silver(I) Sulfide Nanoclusters Protected by Octahedral Iridium(III) Thiolates.  
Goo, Z. L.; Minami, K.; Yoshinari, N.; Konno, T. *Chem. Asian J.* **2021**, *16*, 2641-2647.
- O-21** Highly Porous Ionic Solids Consisting of Au<sup>I</sup><sub>3</sub>Co<sup>III</sup><sub>2</sub> Complex Anions and Aqua Metal Cations.  
Surinwong, S.; Kuwamura, N.; Kojima, T.; Yoshinari, N.; Rujiwatra, A.; Konno, T. *Inorg. Chem.* **2021**, *60*, 122555-12564.
- O-22** A Pseudorotaxane System Containing  $\gamma$ -Cyclodextrin Formed via Chiral Recognition with an Au<sup>I</sup><sub>6</sub>Ag<sup>I</sup><sub>3</sub>Cu<sup>II</sup><sub>3</sub> Molecular Cap.  
Kojima, T.; Takeda, H.; Kuwamura, N.; Konno, T. *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 15981-15985.

- O-23** A Chromotropic Pt<sup>II</sup>Pd<sup>II</sup>Co<sup>II</sup> Coordination Polymer with Dual Electrocatalytic Activity for Water Reduction and Oxidation.  
San Esteban, A. C.; Kuwamura, N.; Yoshinari, N.; Konno, T. *Dalton Trans.* **2021**, *50*, 14730-14737.
- O-24** Comprehensive Thermodynamic Study of Three Co(II)- and Fe(II)-Based Octacyanoniobates.  
Pełka, R.; Konieczny, P.; Miyazaki, Y.; Nakazawa, Y.; Wasiutyński, T.; Budziak, A.; Pinkowicz, D.; Sieklucka, B. *Phys. Rev. B* **2021**, *104*, 214428, 1-18.
- O-25** Chiral Metal Down to 4.2 K – a BDH-TTP Radical-Cation Salt with Spiroboronate Anion B(2-chloromandelate)<sub>2</sub><sup>-</sup>.  
Blundell, T. J.; Brannan, M.; Nishimoto, H.; Kadoya, T.; Yamada, J.; Akutsu, H.; Nakazawa, Y.; Martin, L. *Chem. Comm.* **2021**, *57*, 5406–5409.
- O-26** Fermi Surface Structure and Isotropic Stability of Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov Phase in Layered Organic Superconductor β''-(BEDT-TTF)<sub>2</sub>SF<sub>5</sub>CH<sub>2</sub>CF<sub>2</sub>SO<sub>3</sub>.  
Sugiura, S.; Akutsu, H.; Nakazawa, Y.; Terashima, T.; Yasuzuka, S.; Schlueter, J. A.; Uji, S. *Crystals* **2021**, *11*, 1525, 1-10.
- O-27** Structural, Magnetic and Mössbauer Spectroscopic Studies of the [Fe(3-bpp)<sub>2</sub>](CF<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub> Complex: Role of Crystal Packing Leading to an Incomplete Fe(II) High Spin ⇌ Low Spin Transition.  
Sugiyarto, K. H.; Onggo, D.; Akutsu, H.; Reddy, V. R.; Sutrisno, H.; Nakazawa, Y.; Bhattacharjee, A. *CrystEngComm* **2021**, *23*, 2854-2861.
- O-28** Exceptionally High Temperature Spin Crossover in Amide-Functionalised 2,6-Bis(pyrazol-1-yl)pyridine Iron(II) Complex Revealed by Variable Temperature Raman Spectroscopy and Single Crystal X-Ray Diffraction.  
Attwood, M.; Akutsu, H.; Martin, L.; Blundell, T. J.; Le Maguere, P.; Turner, S. S. *Dalton Trans.* **2021**, *50*, 11843–11851.
- O-29** Thermodynamic Measurements of Doped Dimer-Mott Organic Superconductor under Pressure.  
Matsumura, Y.; Yamashita, S.; Akutsu, H.; Nakazawa, Y. *Fiz. Nizk. Temp.* **2021**, *48*, 56, 1-6.

- O-30** Asymmetric *N*-Heteroacene Tetracene Analogues as Potential n-Type Semiconductors.  
Attwood, M.; Kim, D. K.; Hadden, J. H. L.; Maho, A.; Ng, W.; Wu, H.; Akutsu H.; White, A. J. P.; Heutz, S.; Oxborrow, M. *J. Mater. Chem. C* **2021**, *9*, 17073–17083.
- O-31** Magnetic Properties of  $S = 1/2$  Distorted Kagome Antiferromagnet  $\text{CdCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$  with Low-Symmetry Orbital Arrangement.  
Yoshida, H. K.; Noguchi, N.; Ishii, Y.; Oda, M.; Chen, J.; Yamaura, K.; Yamashita, S.; Nakazawa, Y.; Kida, T.; Narumi, Y.; Hagiwara, M. *J. Phys. Soc. Jpn.* **2021**, *90*, 044714, 1-6.
- O-32** Lattice and Charge Fluctuations in a Molecular Superconductors.  
Yamamoto, T.; Naito, T.; Uruichi, M.; Akutsu, H.; Nakazawa, Y. *J. Phys. Soc. Jpn.* **2021**, *90*, 063708, 1-5.
- O-33** New Spin-Crossover Compounds Containing the  $[\text{Ni}(\text{mnt})]$  Anion (mnt = Maleonitriledithiolate).  
Turner, S. S.; Daniell, J.; Akutsu, H.; Holton, P. N.; Coles, S. J.; Schünemann, V. *Magnetochem.* **2021**, *7*, 72, 1–12.
- O-34** First Molecular Superconductor with the Tris(Oxalato)Aluminate Anion,  $\beta''\text{-(BEDTTTF)}_4(\text{H}_3\text{O})\text{Al}(\text{C}_2\text{O}_4)_3\cdot\text{C}_6\text{H}_5\text{Br}$ , and Isostructural Tris(Oxalato)Cobaltate and Tris(Oxalato)Ruthenate Radical Cation Salts.  
Blundell, T. J.; Brannan, M.; Mburu-Newman, J.; Akutsu, H.; Nakazawa, Y.; Imajo, S.; Martin, L. *Magnetochem.* **2021**, *7*, 90, 1–12.
- O-35** Structures and Properties of New Organic Molecule-Based Metals,  $(\text{D})_2\text{BrC}_2\text{H}_4\text{SO}_3$  [D = BEDT-TTF and BETS].  
Akutsu, H.; Koyama, Y.; Turner, S. S.; Nakazawa, Y. *Magnetochem.* **2021**, *7*, 91, 1–13.
- O-36** Symmetry Change of *d*-Wave Superconductivity in  $\kappa$ -Type Organic Superconductors.  
Imajo, S.; Kindo, K.; Nakazawa, Y. *Phys. Rev. B* **2021**, *103*, L060508, 1-5.
- O-37** Thermodynamic Evidence for the Formation of a Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov Phase in the Organic Superconductor  $\lambda\text{-(BETS)}_2\text{GaCl}_4$ .  
Imajo, S.; Kobayashi, T.; Kawamoto, A.; Kindo, K.; Nakazawa,



*Y. Phys. Rev. B* **2021**, *103*, L220501, 1-5.

- O-38** Extraordinary  $\pi$ -Electron Superconductivity Emerging from a Quantum Spin Liquid.  
Imajo, S.; Sugiura, S.; Akutsu, H.; Kohama, Y.; Isono, T.; Terashima, T.; Kindo, K.; Uji, S.; Nakazawa, Y. *Phys. Rev. Res.* **2021**, *3*, 033026, 1-9.
- O-39** Electric Dipole Induced Bulk Ferromagnetism in Dimer Mott Molecular Compounds.  
Yoshimoto, R.; Yamashita, S.; Akutsu, H.; Nakazawa, Y.; Kusamoto, T.; Oshima, Y.; Nakano, T.; Yamamoto, H. M.; Kato, R. *Sci. Rep.* **2021**, *11*, 1332, 1-10.
- O-40** Large-Amplitude Thermal Vibration-Coupled Valence Tautomeric Transition Observed in a Conductive One-Dimensional Rhodium–Dioxolene Complex.  
Mitsumi, M.; Komatsu, Y.; Hashimoto, M.; Toriumi, K.; Kitagawa, Y.; Miyazaki, Y.; Akutsu, H.; Akashi, H. *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 3074-3084.
- O-41** Physical implementation of reservoir computing through electro-chemical reaction.  
Kan S.; Asai T.; Nakajima K.; and Akai-Kasaya M. *Advanced Science*, **2021**, *9*, 2104076-2104076.
- O-42** Long- and short-term conductance control of artificial polymer wire synapses.  
Hagiwara N.; Sekizaki S.; Kuwahara Y.; Asai T.; and Akai-Kasaya M. *Polymers*, **2021**, *13*, 312-322.
- O-43** Adsorption and Light Emission of a Racemic Mixture of [7]thiahetero-helicene-2,13-carboxaldehyde on Au(111), Cu(001), and NiAl(110) Surfaces Investigated Using a Scanning Tunneling Microscope.  
Krukowski P.; Chaunchaiyakul S.; Akai-Kasaya M.; Saito A.; Osuga H.; and Kuwahara Y. *The Journal of Physical Chemistry C*, **2021**, *125*, 9419-9427.
- O-44** Simple reservoir computing capitalizing on the nonlinear response of materials: Theory and physical implementations.  
Kan S.; Nakajima K.; Takeshima Y.; Asai T.; Kuwahara Y.; and Akai-Kasaya M. *Physical Review Applied*, **2021**, *15*, 024030-

024030.

- O-45** Reservoir computing on atomic switch arrays with high precision and excellent memory characteristics.  
Kubota H.; Hasegawa T.; Akai-Kasaya M.; and Asai T. *Journal of Signal Processing*, **2021**, 25, 123-126.
- O-46** Applying a molecular device to stochastic computing operation for a hardware AI system design.  
Kan S.; Sasaki Y.; Asai T.; and Akai-Kasaya M.; *Journal of Signal Processing*, **2021**, 25, 221-225.
- O-47** Synergistic Enhancement of the Lubrication Performance of Zinc Dialkyldithiophosphate by Coexistence with Ionic Liquid.  
Sato, K.; Okubo, H.; Kawada, S.; Watanabe, S.; Sasaki, S. *Tribology Online* **2021**, 16(3), 178-191.
- O-48** Boundary lubricity of phosphonium bisoxalatoborate ionic liquids.  
Rohlmann, P. Watanabe, S.; Shimpf, M.; Leckner, J.; Harper, J.B.; Rutland, M.W.; Glavatskih, S. *Tribology International* **2021**, 161, 107075.
- O-49** Durability Improvement of Concentrated Polymer Brushes by Multiscale Texturing.  
Watanabe, S.; Kodama, E.; Tadokoro, C.; Sakakibara, K.; Nakano, K.; Sasaki, S.; Tsujii, Y. *Tribology Letters* **2021**, 69(3), 99.
- O-50** 血管構造プリンティングにおける形状精度の向上を目的とした架橋材および架橋システムの開発。  
森田 智博, 渡部 誠也, 佐々木 信也, *精密工学会誌* **2021**, 87(6), 574-580.
- O-51** Tribological properties of a mesh-like nanostructured diamond-like carbon (DLC) lubricated with a fully formulated oil at DLC/steel contacts under boundary lubrication.  
Okubo, H.; Watanabe, S.; Sasaki, S.; Tokuta, Y.; Moriguchi, H.; Iba, D.; Moriwaki, I. *Coatings* **2021**, 11(7), 746.
- O-52** ZnDTP と FM 共存下の摩擦特性と吸着特性に関する研究  
小野寺 康, 佐藤 魁星, 渡部 誠也, 佐々木 信也, *トライボロジスト* **2021**, 66(5), 363-371.

- O-53** CVT 油潤滑下で形成するトライボフィルムの機械的特性が摩擦現象に与える影響  
二藤 優, 渡部 誠也, 佐々木 信也, *自動車技術会論文集* **2021**, 52(3), 574-581.
- O-54** Effect of surface texturing on the durability of concentrated polymer brushes.  
Watanabe, S.; Kodama, E.; Sakakibara, K.; Sasaki, S.; Tsujii, Y. *Tribology International* **2021**, 155, 106668.
- O-55** Friction and Wear Properties of Hard Coatings on Steel Surfaces under Lubrication with a Fully Formulated Oil with a Mo Additive.  
Nakagome, K.; Sato, K.; Okubo, H.; Kawada, S.; Watanabe, S.; Sasaki, S. *Tribology Online* **2021**, 16(1), 59-69.
- O-56** MoDTC と吸着型 FM 共存下の摩擦特性に関する研究  
小野寺 康, 佐藤 優子, 佐藤 魁星, 渡部 誠也, 佐々木 信也, *トライボロジスト* **2021**, 66(1), 77-85.
- O-57** Lateral Distribution of Optical Excitation at Boundaries around Rubrene Islands Visualized by Microspot Two-Photon Photoemission Spectroscopy.  
Okaue, D.; Hayashi, R.; Wakayama, K.; Ito, N.; Munakata, T.; Yamada, T. *Surf. Sci.*, **2021**, 709, 121847.
- O-58** Accessing the Conduction Band Dispersion in CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> Single Crystals.  
Yang, J.; Sato, H.; Orio, H.; Liu, X.; Fahlman, M.; Ueno, N.; Yoshida, H.; Yamada, T.; Kera, S. *J. Phys. Chem. Lett.*, **2021**, 12, 3773–3778.
- O-59** Revisit of XPS Studies of Supersonic O<sub>2</sub> Molecular Adsorption on Cu(111): Copper Oxides.  
Hayashida, K.; Tsuda, Y.; Yamada, T.; Yoshigoe, A.; Okada, M. *ACS Omega.*, **2021**, 6, 26814–26820.
- O-60** Pt/CeO<sub>2</sub> with residual chloride as reusable soft Lewis acid catalysts: Application to highly efficient isomerization of allylic esters.  
Huang, Qi-An; Haruta, A.; Kumamoto, Y.; Murayama, H.; Yamamoto, E.; Honma, T.; Okumura, M.; Nobutou, H.; Tokunaga, M., *Applied Catalysis B: Environmental*, **2021**, 296, 120333, 1-9.

- O-61** Estimation of spin contamination errors in DFT/plane-wave calculations of solid materials using approximate spin projection scheme.  
Tada, K.; Yamanaka, S.; Kawakami, T.; Kitagawa, Y.; Okumura, M.; Yamaguchi, K.; Tanaka, S., *Chemical Physics Letters*, **2021**, 765, 138291, 1-8.
- O-62** Partial oxidation of propylene with H<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> over Au supported on ZrO<sub>2</sub> with different structural and surface properties.  
Zheng, Y.; Okumura, M.; Hua, X.; Sonoura, A.; Su, H.; Nobutou, H.; Sun, X.; Sun, L.; Xiao, F.; Qi, C., *Journal of Catalysis*, **2021**, 401, 188-199.
- O-63** Theoretical Study on Redox Potential Control of Iron-Sulfur Cluster by Hydrogen Bonds: A Possibility of Redox Potential Programming.  
Era, I.; Kitagawa, Y.; Yasuda, N.; Kamimura, T.; Amamizu, N.; Sato, H.; Cho, K.; Okumura, M.; Nakano, M., *Molecules*, **2021**, 26, 6129, 1-13.
- O-64** Effect of surface interactions on spin contamination errors of homogeneous spin dimers, chains, and films: model calculations of Au/MgO and Au/BaO systems.  
Tada, K.; Hayashi, A.; Maruyama, T.; Koga, H.; Yamanaka, S.; Okumura, M.; Tanaka, S., *Molecular Physics*, **2021**, 119, e1791989.
- O-65** Electron Density-based Estimation of Diradical Character: An Easy Scheme for DFT/Plane-wave Calculations.  
Tada, K.; Kitagawa, Y.; Kawakami, T.; Okumura, M.; Tanaka, S., *Chemistry Letters*, **2021**, 50, 392-396.
- O-66** Gibbs Energy of Hydrogen Adsorption on Pt Surface by Machine Learning Potential and Metadynamics.  
Hayashi, A.; Ato, Y.; Yamamoto, A.; Yoshida, H.; Yamanaka, S.; Kawakami, T.; Okumura, M., *Chemistry Letters*, **2021**, 50, 1329-1332.
- O-67** Extension of the Linear Response Function of Electron Density to a Plane-wave Basis and the First Application to Periodic Surface Systems.  
Maruyama, T.; Ohnari, J.; Tada, K.; Hinuma, Y.; Kawakami, T.; Yamanaka, S.; Okumura, M., *Chemistry Letters*, **2021**, 50, 1801-1805.

- O-68** Can we enhance diradical character using interaction with stoichiometric surfaces of ionic oxides? A theoretical investigation using chemical indices.  
Tada, K.; Ozaki, H.; Fujimaru, K.; Kitagawa, Y.; Kawakami, T.; Okumura, M., *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2021**, *23*, 25024-25028.
- O-69** Strong Metal–Support Interaction in Pd/Ca<sub>2</sub>AlMnO<sub>5</sub>+ $\delta$ : Catalytic NO Reduction over Mn-Doped CaO Shell.  
Hosokawa, S.; Oshino, Y.; Tanabe, T.; Koga, H.; Beppu, K.; Asakura, H.; Teramura, K.; Motohashi, T.; Okumura, Mitsutaka; Tanaka, T., *ACS Catalysis*, **2021**, *11*, 7996-8003.
- O-70** In-Material Reservoir Computing in a Sulfonated Polyaniline Network.  
Usami, Y.; van de Ven, B.; Mathew, D. G.; Chen, T.; Kotooka, T.; Kawashima, Y.; Tanaka, Y.; Otsuka, Y.; Ohyama, H.; Tamukoh, H.; Tanaka, H.; van der Wiel, W. G.; Takuya Matsumoto, T. *Advanced Materials* **2021**, *33*, 2102688, 1-9 (Frontispiece 2170379).
- O-71** Sacrificial Gold Coating Enhances Transport of Liquid Metal in Pressurized Fountain Pen Lithography.  
Livshits, G. I.; Bao, J.; Sakamoto, L.; Usami, Y.; Otsuka, Y.; Matsumoto, T. *Sci. Rep.* **2021**, *11*, 4670, 1-9.
- O-72** Revisit of XPS Studies of Supersonic O<sub>2</sub> Molecular Adsorption on Cu(111): Copper Oxides.  
Hayashida, K.; Tsuda, Y.; Yamada, T.; Yoshigoe, A.; Okada, M. *ACS Omega*, **2021**, *6*, 26814–26820.
- O-73** Accessing the Conduction Band Dispersion in CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> Single Crystals.  
Yang, J.; Sato, H.; Orio, H.; Liu, X.; Fahlman, M.; Ueno, N.; Yoshida, H.; Yamada, T.; Kera, S. *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, *12*, 3773–3778.
- O-74** Lateral Distribution of Optical Excitation at Boundaries around Rubrene Islands Visualized by Microspot Two-Photon Photoemission Spectroscopy.  
Okaue, D.; Hayashi, R.; Wakayama, K.; Ito, N.; Munakata, T.; Yamada, T. *Surf. Sci.* **2021**, *709*, 121847, 1-6.

- O-75** High spatial resolution multimodal imaging by tapping-mode scanning probe electrospay ionization with feedback control.  
Otsuka, Y.; Kamihoriuchi, B.; Takeuchi, A.; Iwata, F.; Tortorella, S.; Matsumoto, T. *Anal. Chem.* **2021**, *93*, 2263-2272.
- O-76** Regulatory Switching by Concerted Motions on the Microsecond Timescale of the Oxygen Sensor Protein FixL.  
Yamawaki, T.; Mizuno, M.; Ishikawa, H.; Takemura, K.; Kitao, A.; Shiro, Y.; Mizutani, Y. *J. Phys. Chem. B* **2021**, *125*, 6847-6856.
- O-77** Resonance Raman Determination of Chromophore Structures of Heliorhodopsin Photointermediates.  
Urui, T.; Mizuno, M.; Otomo, A.; Kandori, H.; Mizutani, Y. *J. Phys. Chem. B* **2021**, *125*, 7155-7162.
- O-78** Strongly hydrogen-bonded Schiff base and adjoining polyene twisting in the retinal chromophore of schizorhodopsins.  
Shionoya, T.; Mizuno, M.; Singh, M.; Kandori, H.; Mizutani, Y. *Biochemistry* **2021**, *60*, 3050-3057.
- O-79** Synthesis of Anthracene-Based Cyclic  $\pi$ -Clusters and Elucidation of their Properties Originating from Congested Aromatic Planes.  
Nishiuchi, T.; Kisaka, K.; Kubo, T. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 5400-5406.
- O-80** Biradicaloid Behavior of a Twisted Double Bond.  
Hamamoto, Y.; Hirao, Y.; Kubo, T. *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, *12*, 4729-4734.
- O-81** Spin-Spin Interactions in One-Dimensional Assemblies of a Cumulene-Based Singlet Biradical.  
Hirao, Y.; Daifuku, Y.; Ihara, K.; Kubo, T. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 21319-21326.
- O-82** Long Carbon-Carbon Bonding beyond 2Å in Tris(9-fluorenylidene)methane.  
Kubo, T.; Suga, Y.; Hashizume D.; Suzuki, H.; Miyamoto, T.; Okamoto, H.; Kishi, R.; Nakano, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 14360-14366.
- O-83** Optical nature of non-substituted triphenylmethyl cation: Crystalline

state emission, thermochromism, and phosphorescence.

Nishiuchi, T.; Sotome, H.; Fukuuchi, R.; Kamada, K.; Miyasaka, H.; Kubo, T. *Aggregate* **2021**, *2*, e126, 1-10.

- O-84** Outstanding Enhancement in the Axial Coordination Ability of the Highly Rigid Cofacial Cyclic Metalloporphyrin Dimer.  
Yamashita, K.; Furutani, K.; Ogawa, T. *Asian J. Org. Chem.* **2021**, *10*, 1192-1197.
- O-85** Magnetic Circularly Polarized Luminescence from Pt<sup>II</sup>OEP and F<sub>2</sub>-ppyPt<sup>II</sup>(acac) under North-up and South-up Faraday Geometries.  
Matsudaira, K.; Mimura, Y.; Hotei, J.; Yagi, S.; Yamashita, K.; Fujiki, M.; Imai, Y. *Chem. – Asian J.* **2021**, *16*, 926–930.
- O-86** Fe(II)/Co(II)-Fused Triphenyl Porphyrin Dimer as Candidate for Oxygen Reduction Reaction Catalyst.  
Wibowo, A. H.; Pradifta, A.; Masykur, A.; Yamashita, K.; Tani, Y.; Akbar, A. Y.; Ogawa, T. *Indones. J. Chem.* **2021**, *21*, 871.
- O-87** Room-temperature phosphorescence of a supercooled liquid: kinetic stabilisation by desymmetrisation.  
Komura, M.; Ogawa, T.; Tani, Y. *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 14363-14368.
- O-88** Structure–property relationship in contrasting aggregation-induced enhancement/quenching of emission in rigid aromatic molecules.  
Tani, Y.; Ogawa, T. *J. Mater. Chem. C* **2021**, *9*, 4281-4288.
- O-89** Molecular recognition of sialoglycans by streptococcal Siglec-like adhesins: toward the shape of specific inhibitors.  
Carluccio, C.; Forgione, R. E.; Bosso, A.; Yokoyama, S.; Manabe, Y.; Pizzo, E.; Molinaro, A.; Fukase, K.; Fragai, M.; Bensing, B. A.; Marchetti, R.; Silipo A. *RSC Chem. Biol.* **2021**, *2*, 1618-1630.
- O-90** Chemical Synthesis of Sialyl N-Glycans and Analysis of Their Recognition by Neuraminidase.  
Shirakawa, A.; Manabe, Y. Marchetti, R.; Yano, K.; Masui, S.; Silipo, A.; Molinaro, A.; Fukase, K. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*(46), 24686-24693.
- O-91** Energetics of lipid transport by the ABC transporter MsbA is lipid dependent.



Guo, D., Singh, H., Shimoyama, A., Rowe, S., Guffick, C., Noel, T., Fukase, K., Spring, D., van Veen, H.W., *Communications Biology* **2021**, *4*, 1379.

- O-92** Chemically Synthesized Alcaligenes Lipid A as an Adjuvant to Augment Immune Responses to Haemophilus Influenzae Type Conjugate Vaccine.  
Liu, Z., Hosomi, K., Shimoyama, A., Yoshii, K., Sun, X., Lan, H., Wang, Y., Yamaura, H., Kenneth, D., Saika, A., Nagatake, T., Kiyono, H., Fukase, K., Kunisawa, J., *Frontiers in Pharmacology* **2021**, *12*, 763657.
- O-93** Intratumoral administration of astatine-211-labeled gold nanoparticle for alpha therapy.  
Kato, H., Huang, X., Kadonaga, Y., Katayama, D., Ooe, K., Shimoyama, A., Kabayama, K., Toyoshima, A., Shinohara, A., Hatazawa, J., Fukase, K., *Journal of Nanobiotechnology* **2021**, *19*, 223.
- O-94** Lipopolysaccharide derived from the lymphoid-resident commensal bacteria *Alcaligenes faecalis* functions as an effective nasal adjuvant to augment IgA antibody and Th17 cell responses.  
Wang, Y., Hosomi, K., Shimoyama, A., Yoshii, K., Nagatake, T., Fujimoto, Y., Kiyono, H., Fukase, K., Kunisawa, J., *Frontiers in Immunology* **2021**, *12*, 699349.
- O-95** Lipopolysaccharide from Gut-Associated Lymphoid Tissue-Resident *Alcaligenes faecalis*: Complete Structure Determination and Chemical Synthesis of its Lipid A.  
Shimoyama, A., Lorenzo, F.D., Yamaura, H., Mizote, K., Palmigiano, A., Pither, M.D., Speciale, I., Uto, T., Masui, S., Sturiale, L., Garozzo, D., Hosomi, K., Shibata, N., Kabayama, K., Fujimoto, Y., Silipo, A., Kunisawa, J., Kiyono, H., Molinaro, A., Fukase, K. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60(18)*, 10023-10031.
- O-96**  $\alpha$ -Emitting cancer therapy using  $^{211}\text{At}$ -AAMT targeting LAT1.  
Kaneda-Nakashima, K.; Zhang, Z.; Manabe, Y.; Shimoyama, A.; Kabayama, K.; Watabe, T.; Kanai, Y.; Ooe, K.; Toyoshima, A.; Shirakami, Y.; Yoshimura, T.; Fukuda, M.; Hatazawa, J.; Nakano, T.; Fukase, K.; Shinohara, A. *Cancer Sci.*, **2021**, *112(3)*, 1132-1140.

- O-97** Behavior of glycolylated sialoglycans in the binding pockets of murine and human CD22.  
Carluccio, D. C.; Forgione, R. E.; Montefiori, M.; Civera, M.; Sattin, S.; Smaldone, G.; Fukase, K.; Manabe, Y.; Crocker, P. R.; Molinaro, A.; Marchetti, R.; Silipo, A. *iScience*, **2021**, *24*(1), 101998.
- O-98** Synthesis of ABO blood group antigens and functional glycan display on the cell surface.  
Tsutsui, M.; Manabe, Y.; Kabayama, K.; Fukase, K. *Arkivoc*, **2021**, *iv*, 168-185.
- O-99** Studies in glycopeptide synthesis.  
Kajihara, Y.; Nishikawa, R.; Maki, Y.; Okamoto, R. *Arkivoc* **2021**, *iv*, 230-240.
- O-100** Glycoprotein Semisynthesis by Chemical Insertion of Glycosyl Asparagine Using a Bifunctional Thioacid-Mediated Strategy.  
Nomura, K.; Maki, Y.; Okamoto R.; Satoh, A.; Kajihara, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 10157-10167.
- O-101** Purified EDEM3 or EDEM1 Alone Produces Determinant Oligosaccharide Structures from M8B in Mammalian Glycoprotein ERAD.  
George, G.; Ninagawa, S.; Yagi, H.; Furukawa, J.I.; Hashii, N.; Ishii-Watabe, A.; Deng, Y.; Matsushita, K.; Ishikawa, T.; Mamahit, Y. P.; Maki, Y.; Kajihara, Y.; Kato, K.; Okada, T.; Mori, K. *eLife* **2021**, *10*, e70357.
- O-102** PIGG variant pathogenicity assessment reveals characteristic features within 19 families.  
Tremblay-Laganière, C.; Maroofian, R.; Nguyen, T.T.M.; Karimiani, E. G.; Kirmani, S.; Akbar, F.; Ibrahim, S.; Afroze, B.; Doosti, M.; Ashrafzadeh, F.; Babaei, M.; Efthymiou, S.; Christoforou, M.; Sultan, T.; Ladda, R. L.; McLaughlin, H. M.; Truty, R.; Mahida, S.; Cohen, J. S.; Baranano, K.; Ismail, F. Y.; Patel, M. S.; Lehman, A.; Edmondson, A. C.; Nagy, A.; Walker, M. A.; Mercimek-Andrews, S.; Maki, Y.; Sachdev, R.; Macintosh, R.; Palmer, E. E.; Mancini, G. M. S.; Barakat, T. S.; Steinfeld, R.; Rüscher, C. T.; Stettner, G. M.; Wagner, M.; Wortmann, S. B.; Kini, U.; Brady, A. F.; Stals, K. L.; Ismayilova, N.; Ellard, S.; Bernardo, D.; Nugent, K.; McLean, S. D.; Antonarakis, S. E.; Houlden, H.; Kinoshita, T.; Campeau, P. M.;

Murakami, Y. *Genet. Med.* **2021**, *23*, 1873-1881.

- O-103** Chemical Synthesis and Characterization of a Nonfibrillating Glycoglucagon.  
Liu, M.; Zhao, P.; Uddin, M. H.; Li, W.; Lin, F.; Chandrashekar, C.; Nishiuchi, Y.; Kajihara, Y.; Forbes, B. E.; Wootten, D.; Wade, J. D.; Hossain, M. K. *Bioconjugate Chem.* **2021**, *32*, 2148-2153.
- O-104** FRET Detects Lateral Interaction Between Transmembrane Domain of EGF Receptor and Ganglioside GM3 in Lipid Bilayers.  
Nakano, M.; Hanashima, S.; Hara, T.; Kabayama, K.; Asahina, Y.; Hojo, H.; Komura, N.; Ando, H.; Nyholm, T. K. M.; Slotte, J. P.; Murata, M. *Biochim. Biophys. Acta Biomembr.* **2021**, *1863*, 183623.
- O-105** Diosgenin-induced Physicochemical Effects on Phospholipid Bilayers in Comparison with Cholesterol.  
Ondevilla, J. C.; Hanashima, S.; Mukogawa, A.; Umegawa, Y.; Murata, M. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2021**, *36*, 127816.
- O-106**  $\beta$ -Glucosylation of Cholesterol Reduces Sterol-Sphingomyelin Interactions.  
Hanashima, S.; Fukuda, N.; Malabed, R.; Murata, M.; Kinoshita, M.; Greimel, P.; Hirabayashi, Y. *Biochim. Biophys. Acta Biomembr.* **2021**, *1863*, 183496.
- O-107** 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. *Japanese Journal of Applied Physics.* **2021**, *60*, 15506.
- O-108** Label-Free Phase Change Detection of Lipid Bilayers Using Nanoscale Diamond Magnetometry.  
Ishiwata, H.; Watanabe, H. C.; Hanashima, S.; Iwasaki, T.; Hatano, M. *Advanced Quantum Technologies* **2021**, *4*, 2000106.
- O-109** Complex Formation of Silver(I) Ions with a Glucosinolate Derivative: Structural and Mechanistic Insights into Myrosinase-mimicking C-S Bond Cleavage.  
Alba, Lorenzo D. V.; Hatanaka, T.; Franco, F. C., Jr.; Nojiri M.; Noel, M. G.; Funahashi, Y. *Dalton Trans.* **2021**, *50*, 8292-8296.

- O-110** Enantioselective Reaction of 2H-Azirines with Oxazol-5-(4H)-ones Catalyzed by Cinchona Alkaloid Sulfonamide Catalysts.  
Fujita, K.; Miura, M.; Funahashi, Y.; Hatanaka, T.; Nakamura, S. *Org. Lett.* **2021**, *23*, 2104-2106.
- O-111** Large-Amplitude Thermal Vibration-Coupled Valence Tautomeric Transition Observed in a Conductive One-Dimensional Rhodium–Dioxolene Complex.  
Mitsumi, M.; Komatsu, Y.; Hashimoto, M.; Toriumi, K.; Kitagawa, Y.; Miyazaki, Y.; Akutsu, H.; Akashi, H. *Chem. Eur. J.* **2021**, *27(9)*, 3074–3084.
- O-112** Dipole Fluctuation and Structural Phase Transition in Hydrogen-Bonding Molecular Assemblies of Mononuclear Cu<sup>II</sup> Complexes with Polar Fluorobenzoate Ligands.  
Takahashi, K.; Miyazaki, Y.; Noro, S.; Nakano, M.; Nakamura, T.; Akutagawa, T. *Dalton Trans.* **2021**, *50(39)*, 13680–13685.
- O-113** Low-Temperature Heat Capacity Anomalies in Ordered and Disordered Phases of Normal and Deuterated Thiophene.  
Miyazaki, Y.; Nakano, M.; Krivchikov, A. I.; Koroyuk, O. A.; Gebbia, J. F.; Cazorla, C.; Tamarit, J. Ll. *J. Phys. Chem. Lett.* **2021**, *12(8)*, 2112–2117.
- O-114** Impact of the Air Atmosphere on Photoinduced Chain Polymerization in Self-Assembled Monolayers of Diacetylene on Graphite.  
Takajo, D.; Sudoh, K. *Langmuir* **2021**, *37(19)*, 6002–6006.
- O-115** Water-Oriented Magnetic Anisotropy Transition.  
Su, S.-Q.; Wu, S.-Q.; Hagihala, M.; Miao, P.; Tan, Z.; Torii, S.; Kamiyama, T.; Xiao, T.; Wang, Z.; Ouyang, Z.; Miyazaki, Y.; Nakano, M.; Nakanishi, T.; Li, J.-Q.; Kanegawa, S.; Sato, O. *Nat. Commun.* **2021**, *12*, 2738, 1–9.
- O-116** Comprehensive Thermodynamic Study of Three Co(II)- and Fe(II)-Based Octacyanonionates.  
Pełka, R.; Konieczny, P.; Miyazaki, Y.; Nakazawa, Y.; Wasiutyński, T.; Budziak, A.; Pinkowicz, D.; Sieklucka, B. *Phys. Rev. B* **2021**, *104(21)*, 214428, 1–18.
- O-117** 3-D Optical Imaging System of Muon Beams Using a Silver Activated Zinc Sulfide (ZnS(Ag)) Sheet Combined With a Mirror.

Yamamoto, S.; Ninomiya, K.; Kawamura, N.; Hirano, Y. *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **2021**, *68*, 2748-2752.

- O-118** Three-dimensional (3D) Optical Imaging of Muon Beam Using a Plastic Scintillator Plate in Water.  
Yamamoto, S.; Ninomiya, K.; Kawamura, N.; Yabe, T.; Hirano, Y. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A*, **2021**, *1015* 165768-165768.
- O-119** Dispersion of Alpha-Nuclides during Animal Experiments.  
Kaneda-Nakashima, K.; Zhang, Z. J.; Nagata, K.; Shirasaki, K.; Kikunaga, H.; Yamamura, T.; Ooe, K.; Watabe, T.; Toyoshima, A.; Yoshimura, T.; Shinohara, A. *Radiation Safety Management*, **2021**, *20*, 29-38.
- O-120** Dynamical Response of Transition-Edge Sensor Microcalorimeters to a Pulsed Charged-Particle Beam  
Okumura, T.; Azuma, T.; Bennett, D. A.; Caradonna, P.; Chiu, H. I.; 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.; Mine, K.; Miyake, Y.; Morgan, K. M.; Ninomiya, K.; Noda, H.; O'Neil, G. C.; Okada, S.; Okutsu, K.; Osawa, T.; Paul, N.; Reintsema, C. D.; Schmidt, D. R.; Shimomura, K.; Strasser, P.; Suda, H.; Swetz, D. S.; Takahashi, T.; Takeda, S.; Takeshita, S.; Tatsuno, H.; Ueno, Y.; Ullom, J. N.; Watanabe, S.; Yamada, S. *IEEE Trans. Appl. Supercond.* **2021**, *31*, 210704.
- O-121** Optical Imaging of Decayed Positrons and Muons with Different Collimators.  
Yamamoto, S.; Ninomiya, K.; Kawamura, N.; Hirano, Y. *J. Instrument.* **2021**, *16*, P08062.
- O-122** De-excitation Dynamics of Muonic Atoms Revealed by High Precision Spectroscopy of Electronic K X-rays Using a Superconducting TES Detector.  
Okumura, T.; Azuma, T.; Bennett, D. A.; Caradonna, P.; Chiu, H. I.; 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.; Kato, D.; Katsuragawa, M.; Kawamura, N.; Kino, Y.; Mine, K.; Miyake, Y.; Morgan, K. M.; Ninomiya, K.; Noda, H.; O'Neil, G. C.; Okada, S.; Okutsu, K.; Osawa, T.; Paul, N.; Reintsema, C. D.; Schmidt, D. R.;

Shimomura, K.; Strasser, P.; Suda, H.; Swetz, D. S.; Takahashi, T.; Takeda, S.; Takeshita, S.; Tatsuno, H.; Tong, X. M.; Ueno, Y.; Ullom, J. N.; Watanabe, S.; Yamada, S. *Phys. Rev. Lett.* **2021**, *127*, 053001

- O-123** Chemical Effect on Muonic Atom Formation through Muon Transfer Reaction in Benzene and Cyclohexane Samples  
Inagaki, M.; Ninomiya, K.; Nambu, A.; Kudo, T.; Terada, K.; Sato, A.; Kawashima, Y.; Tomono, D.; Shinohara, A. *Radiochim. Acta*, **2021**, *109*, 319-326.
- O-124** Interface atom mobility and charge transfer effects on CuO and Cu<sub>2</sub>O formation on Cu<sub>3</sub>Pd(111) and Cu<sub>3</sub>Pt(111).  
Tsuda, Y.; Gueriba, J.S.; Makino, T.; Diño, W.A.; Yoshigoe, A.; Okada, M. *Scientific Reports* **2021**, *11*, 3906, 1-8.
- O-125** Surface Fermi Contours and Phonon Anomalies at the Surface of the Random Alloy.  
Okada, M.; Rotenberg, E.; Kevan, S.D.; Schäfer, J.; Plummer, E.W. *Journal of Physics Communications* **2021**, *5*, 075008, 1-8.
- O-126** Revisit of XPS Studies of Supersonic O<sub>2</sub> Molecular Adsorption on Cu (111): Copper Oxides.  
Hayashida, K.; Tsuda, Y.; Yamada, T.; Yoshigoe, A.; Okada, M. *ACS Omega* **2021**, *6*, 26814-26820.

## 総説・解説

- R-1** Advances, Challenges and Perspectives of Quantum Chemical Approaches in Molecular Spectroscopy of the Condensed Phase.  
Ozaki, Y.; Krzysztof, B. B.; Morisawa, Y.; Yamamoto, S.; Tanabe, I.; Huck, C. H.; Hofer, Y. S. *Chem. Soc. Rev.* **2021**, *50*, 10917-10954.
- R-2** Lithium-, Sodium-, and Potassium-Ion Conduction in Polymeric and Discrete Coordination Systems.  
Yoshinari, N.; Konno, T. *Chem. Lett.* **2021**, *50*, 697-710.
- R-3** Heterometallic coordination polymers as heterogeneous electrocatalysts.  
Kuwamura, N.; Konno, T. *Inorg. Chem. Front.* **2021**, *8*, 2634-2649.

- R-4** Experimental Heat Capacity of Low-Dimensional Systems: Carbon Nanotubes and 1D Atomic and Molecular Chains of Adsorbates.  
Barabashko, M.; Nakazawa, Y. *Netsu Sokutei* **2021**, *48*, 164–170.
- R-5** 学習する有機材料：リザバー計算に向けたニューラルネットワーク形成  
赤井 恵, 浅井 哲也, 中嶋 浩平, 応用物理, **2021**, *90*, 504-508.
- R-6** ナノスケールヘテロ接合構造がもつ触媒反応の理論解析  
奥村光隆. *化学* **2021**, *76*, 70-71.
- R-7** Concerted Motions and Molecular Function: What Physical Chemistry We Can Learn from Light-Driven Ion-Pumping Rhodopsins.  
Mizutani, Y. *J. Phys. Chem. B* **2021**, *125*, 11812-11819.
- R-8** ねじれた二重結合の化学.  
平尾泰一, *生産と技術* **2021**, *73*, 69-71.
- R-9** Syntheses and Properties of Open-Shell  $\pi$ -Conjugated Molecules  
Kubo, T. *Bull. Chem. Soc. Jpn* **2021**, *94*, 2235-2244.
- R-10** 剛直な対面型ポルフィリン環状二量体の合成とその特異的ゲスト包接挙動  
山下健一 *有機結晶部会ニュースレター* **2021**, *48*, 8-9.
- R-11** 機械刺激による室温りん光の Turn-on 応答：同形・異機能な有機結晶に基づく分子運動の評価  
谷洋介、小村真央、小川琢治 *有機結晶部会ニュースレター* **2021**, *48*, 2-3.
- R-12** Lipid A-mediated Bacterial-host Chemical Ecology: Synthetic Research of Bacterial Lipid As and Their Development as Adjuvants.  
Shimoyama, A., Fukase, K., *Molecules* **2021**, *26*(20), 6294.
- R-13** Recent Advances in the Chemical Biology of *N*-Glycans.  
Shirakawa, A.; Manabe, Y.; Fukase, K. *Molecules*, **2021**, *26*(4), 1040.

- R-14** Chemical biology study on *N*-glycans.  
Manabe, Y. *Trends in Glycosci. Glycotechnol.* **2021**, *33(193)*, E63-E67.
- R-15** Impact of Intrinsic and Extrinsic Factors on Cellular Sphingomyelin Imaging with Specific Reporter Proteins.  
Kobayashi, T.; Tomishige, N.; Inaba, T.; Makino, A.; Murata, M.; Yamaji-Hasegawa, A.; Murate. M. *Contact* **2021**, *4*, 1–13.
- R-16** Heavy Atom Detergent/Lipid Combined X-ray Crystallography for Elucidating the Structure-Function Relationships of Membrane Proteins.  
Hanashima, S.; Nakane, T.; Mizohata, E. *Membranes.* **2021**, *11*, 823.
- R-17** 1次元および2次元ナノ空間における水分子の特異な動的挙動  
上田 貴洋, *Acc. Mater. Surf. Res.* **2021**, *6*, 1-10.
- R-18** 量子ビームを用いる分析化学～いまからあなたも仲間入り～ミュオン：量子ビームを用いる非破壊分析  
二宮和彦, *ぶんせき* **2021**, *1015*, 165768
- R-19** 緒方洪庵が遺した“開かずの薬瓶”の中身とは？～ミュオンビームによる医療文化財の非破壊分析  
二宮和彦, 高浦佳代子, 高橋京子 *化学* **2021**, *76*, 35-466.

## 出版物

- B-1** 基礎教育シリーズ 分析化学 基礎編 第2版  
本水昌二, 朝本紘充, 石坂昌司, 井原敏博, 内山一美, 齊藤和憲, 佐藤健二, 塚原 聡, 中釜達朗, 西澤精一, 沼田 靖, 南澤宏明, 森田孝節, 吉川賢治, 東京教学社 **2021**
- B-2** 基礎教育シリーズ 分析化学 機器分析編 第2版  
本水昌二, 朝本紘充, 石坂昌司, 井原敏博, 内山一美, 齊藤和憲, 佐藤健二, 塚原 聡, 中釜達朗, 西澤精一, 沼田 靖, 南澤宏明, 森田孝節, 吉川賢治, 東京教学社 **2021**
- B-3** Evolving Conductive Polymer Neural Networks on Wetware.



Akai-Kasaya M. and Asai T., Handbook of Unconventional Computing vol. 2, Adamatzky A. Ed.; *World Scientific*, **2021**

**B-4** CSJ カレントレビュー39 : 生体分子と疾患、リピド A と免疫アジュバントへの展開  
下山敦史, 深瀬浩一, 化学同人, **2021**, 106-114.

**B-5** フローマイクロ合成の最新動向  
深瀬浩一, 真鍋良幸, 下山敦史, シーエムシー出版, **2021**, 113-121.

**B-6** Middle Molecular Strategy, Conjugation Strategies for Development of Bioactive Middle Molecules.  
Y. Manabe, A. Shimoyama, K. Kabayama, K. Fukase, Springer, **2021**, 3-20.

**B-7** 光学顕微鏡  
手老龍吾, 樺山一哉, *図説 表面分析ハンドブック* (日本表面科学会) 朝倉書店, **2021**, 214-219.

## その他

**M-1** 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. *RIKEN Accel. Prog. Rep.* **2021**, 54, 150.

**M-2** 固体中のイオン伝導 水和カリウムイオンによる超イオン伝導金属錯体  
吉成信人, 今野巧, *セラミックス* **2021**, 56, 582-585.

**M-3** 電荷ガラス状態を形成する分子性化合物の熱輸送特性  
野本哲也, 山下智史, 坪 広樹, 中澤康浩 *低温センター研究報告書 (令和2年度)*, **2021**, 21-25.

**M-4** たった 1 つの-CH 基の向きの違いで物性が変わった -不斉中

心を有する有機伝導体 $\beta''$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>(*rac*-および *S*-PROXYL-CONHCH<sub>2</sub>SO<sub>3</sub>) の構造と物性の比較-

坪 広樹, *低温センターだより*, **2021**, *171*, 2-8.

**M-5** 音を奏でる気柱振動ヘリウム液面計

坪 広樹, *低温センターだより*, **2021**, *171*, 13-14.

**M-6** フロギストン 核スピンの超微細構造

中澤康浩, *熱測定*, **2021**, *48*, 172-173.

**M-7** フロギストン 回転トンネル現象

中澤康浩, *熱測定*, **2021**, *48*, 173.

**M-8** プロトン-電子カップル型分子性結晶および二分子膜における機能開拓

森初果, 加藤浩之, 藤野智子, 上田顕, 吉信淳, *セラミックス* **2021**, *56*, 88-91.

**M-9** 単分子膜内の分子構造と物性変化

加藤浩之, *生産と技術* **2021**, *73*, 114-117.

**M-10** Advances in Structural Analysis of Glycan.

Maki, Y. *Trends Glycosci. Glycotechnol.* **2021**, *33*, E47-48.

**M-11** 放射線科学基盤機構 粒子ビーム化学研究室

岡田美智雄, *生産と技術*, **2021**, *73*, 55-57.