

様 式 F - 7 - 1

## 科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）実施状況報告書（研究実施状況報告書）（平成 27 年度）

1. 機関番号 

1	4	6	0	3
---	---	---	---	---

 2. 研究機関名 奈良先端科学技術大学院大学
3. 研究種目名 国際共同研究加速基金（国際活動支援班） 4. 補助事業期間 平成 27 年度～平成 30 年度
5. 課題番号 

1	5	K	2	1	7	1	9
---	---	---	---	---	---	---	---
6. 研究課題名 3D活性サイト科学の海外拠点・国際ネットワーク構築

## 7. 研究代表者

研究者番号	研究代表者名	所属部局名	職名
2 0 1 2 6 1 2 1	ダイヤモンド ヒロシ 大門 寛	物質創成科学研究科	教授

## 8. 研究分担者

研究者番号	研究分担者名	所属研究機関名・部局名	職名
3 0 3 4 4 4 0 1	ササキ ユウジ 佐々木 裕次	東京大学・新領域創成科学研究科	教授
2 0 3 0 4 1 6 5	ノムラ コトヒロ 野村 琴広	首都大学東京・理工学研究科	教授
2 0 2 8 3 6 3 2	ハヤシ コウイチ 林 好一	名古屋工業大学・工学（系）研究科（研究院）	教授
6 0 2 0 2 0 4 0	キノシタ トヨヒコ 木下 豊彦	公益財団法人高輝度光科学研究センター・利用研究促進部門	主席研究員
4 0 3 3 4 2 0 5	ワカバヤシ ユウスケ 若林 裕助	大阪大学・基礎工学研究科	准教授

## 9. 研究実績の概要

国際支援活動班の目標は新学術領域研究「3D活性サイト科学」を基盤とした強い日本の科学技術を世界に広めることである。まず、ホログラムデータ形式の標準化や解析コードの配布を目指したデータベース構築を始めた。そのために有力な海外研究者を本新学術領域研究活動に参画させ、本領域の概念と意義について深く理解するユーザー開拓を行っている。また、国際活動支援体制の基盤作りとして、欧州の放射光実験施設内に拠点の設置を準備している。中型放射光施設MAX IV(Sweden)に出向き、施設責任者と拠点活動についての協議を行った。並行してESRF(仏)とSLS(Swiss)にて共同実験を行った。松下・松井・大門らが開発している小型・高性能分析器をMAX IV/SLSの軟X線ビームラインに設置することを前提に、実際に現地で共同製作するなど技術供与・共同研究の具体案を協議した。この新型分析器の重要部品である高精度加工電極メッシュは国内で準備する。さらに蛍光X線ホログラフィーについては高速蛍光X線検出装置を新たに現地で製作して、ESRFのゴニオメータに組み込む。装置の重要部品である湾曲グラフィートは国内で準備し、他の部分は林・細川が主導して現地で共同開発する。第一原理オーダーN法コードConquestへの有限温度分子動力学法と、反応自由エネルギー障壁計算手法の組み込みによりポルドー大グループと共同研究に着手した。不均一触媒反応に適用し、大規模シミュレーションによるナノ触媒の特異な反応性を発現する「反応の活性サイト」の構造と電子状態を調べ、反応性を支配する要因について明らかにすることを目指し、森川が現地で基盤づくりのための打合せを行った。蛍光X線ホログラフィー測定の検出器として新たに候補となるエネルギー分解型光子数計数2次元検出器の適用について、佐藤が開発元であるDESYグループへ赴き、共同研究及び試用実験の可能性について協議を行った。

## 10. キーワード

- |                |                 |                |                |
|----------------|-----------------|----------------|----------------|
| (1) 活性サイト      | (2) 不純物         | (3) 先端材料       | (4) 光電子ホログラフィー |
| (5) 蛍光X線和光ラフィー | (6) 表面界面ホログラフィー | (7) 電子回折イメージング | (8) 第一原理計算     |

## 11. 現在までの進捗状況

(区分)(2) おおむね順調に進展している。

(理由)

本領域メンバーは個人レベルで国外放射光施設での実験が日常化しており、また領域メンバーを海外で継続的に活動できる海外研究拠点についても、申請準備段階から協議を続けてきた。今回、ESRFおよびスイス放射光施設にてビームタイムを獲得し、共同実験を実施し、並行して当新学術領域の活動にて開発してきた分析器・解析ソフトの普及について議論する機会を確保できた。海外で使用する分析器用の直流電流・電圧発生器および湾曲グラフィットの購入を予定通り行った。

## 12. 今後の研究の推進方策 等

(今後の推進方策)

平成27年度に引き続き、2次元光電子検出装置と高速蛍光X線検出装置の開発を欧州の海外放射光施設において進める。また、それらを用いて原子分解能ホログラムの測定を行う。国内から、特に若手研究者を派遣し実験を行う。測定法については分かりやすい英語版の動画を作成し、YouTubeにアップロードするなどの活動も行う。

Neel研究所を拠点に、欧州内の優れた試料を収集するが、より先端の計測を要する場合には、装備の整っている国内施設での実験が望ましい。この場合16年度以降のビームタイムを海外研究者のために、成果公開優先課題等の制度を利用して確保し実験を行う。一方、LIGA プロセス発祥の地である独Karlsruher工科大学グループと、表面・界面ホログラフィーに最適化したX線集光素子の共同開発を行う。また、有機物質については、Marburg大を拠点とした探索を行う。

初年度に引き続き、London大及びBordeaux大と共同で大規模シミュレーションコードの開発を行う。Conquestコードに自由energy計算手法を組み込み、数万から数十万原子を含む不均一触媒反応のシミュレーションを可能にすることによって、不均一触媒の活性サイトの構造と電子状態、クラスターサイズと反応性の関連性について、活性サイトの原子配列の結果と併せることによって機構を解明する。国際共同研究の拠点となるMAX IVと共同で2017年度に3D活性サイト科学の研究交流ワークショップを計画している。

これらの計画を実行することにより多くの成果が得られる。関わった研究者らを一堂に集め議論する機会が、コミュニティを形成する上で重要である。そのための準備として海外研究協力者や国際アドバイザーとの打ち合わせを行う。

(次年度使用額が生じた理由と使用計画)

(理由)

平成27年度に購入予定であった「楕円メッシュ電極」(一式)が製造業者の都合によって納入が遅れているため。

(使用計画)

平成28年度前半にすべて納入予定。

(課題番号: 15K21719)

(注)・印刷に当たっては、A4判(縦長)・両面印刷すること。

(2/7)

## 13. 研究発表(平成27年度の研究成果)

(雑誌論文) 計(7)件/うち査読付論文 計(7)件/うち国際共著 計(4)件/うちオープンアクセス 計(0)件

著 者 名		論 文 標 題				
F. Matsui, N. Maejima, H. Matsui, H. Nishikawa, H. Daimon, T. Matsushita,		Circular Dichroism in Cu Resonant Auger Electron Diffraction				
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著
Zeitschrift fur Physikalische Chemie		有	230	2 0 1 6	519	該当する
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)						
DOI: 10.1515/zpch-2015-0665						
オープンアクセス						
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難						

著 者 名		論 文 標 題				
J.-F. Berar, N. Boudet, N. Blanc, and S. Hosokawa		Resonant scattering in condensed matter, experiments that reveal short to long range atomic order				
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著
Zeitschrift fur Physikalische Chemie		有	230	2 0 1 6	301-311	該当する
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1515/zpch-2015-0699						
オープンアクセス						
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難						

著 者 名		論 文 標 題				
S. Hosokawa, J. R. Stellhorn, W.-C. Pilgrim, and J.-F. Berar		Anomalous x-ray scattering on semiconducting glasses at ESRF: review in recent fifteen years				
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著
Zeitschrift fur Physikalische Chemie		有	230	2 0 1 6	313-338	該当する
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1515/zpch-2015-0653						
オープンアクセス						
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難						

著 者 名		論 文 標 題				
J. R. Stellhorn, S. Hosokawa, W.-C. Pilgrim, Y. Kawakita, K. Kamimura, K. Kimura, N. Blanc, and N. Boudet		Structural aspects of the superionic conduction mechanism in Ag-GeSe <sub>3</sub> glasses				
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著
Zeitschrift fur Physikalische Chemie		有	230	2 0 1 6	369-386	該当する
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1515/zpch-2015-0667						
オープンアクセス						
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難						

著 者 名		論 文 標 題				
T. Uchida, S. Liu, M. Enari, S. Oshita, K. Yamazaki, K. Gohara		Effect of NaCl on the lifetime of micro- and nanobubbles				
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著
Nanomaterials		有	6	2 0 1 6	31-(1-10)	-
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
doi:10.3390/nano6020031						
オープンアクセス						
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難						

著 者 名		論 文 標 題				
T. Uchida, K. Yamazaki, K. Gohara		Generation of micro- and nano-bubble distributions in water via dissociation of gas hydrates				
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著
Korean. J. Chem. Eng		有	33-5	2 0 1 6	1749-1755	-
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
10.1007/s11814-016-0032-7						
オープンアクセス						
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難						

著 者 名		論 文 標 題				
T. Mitsudome, T. Urayama, K. Yamazaki, Y. Maehara, J. Yamasaki, K.		Design of core-Pd/shell-Ag nanocomposite catalyst for selective semihydrogenation of alkynes				
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著
ACS Catal.		有	6	2 0 1 5	666-670	-
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)						
DOI: 10.1021/acscatal.5b02518						
オープンアクセス						
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難						

(学会発表) 計(5)件/うち招待講演 計(4)件/うち国際学会 計(0)件

発 表 者 名		発 表 標 題	
T. Fukumura		Oxide electronics	
学 会 等 名		発表年月日	発 表 場 所
Seminar at National Chiao Tung University (招待講演)		2015年11月20日	Hsinchu (Taiwan)

発 表 者 名		発 表 標 題	
Hiroshi Daimon		3D atomic arrangement analysis around specific atoms by photoelectron holography, x-ray fluorescent holography, and stereo-picture of atomic arrangement	
学 会 等 名		発表年月日	発 表 場 所
Hamburg Seminar (招待講演)		2015年12月11日	Hamburg (Germany)

発 表 者 名		発 表 標 題	
T. Fukumura		Oxide electronics	
学 会 等 名		発表年月日	発 表 場 所
Seminar at National Chung Hsing (招待講演)		2015年11月18日	Taichung (Taiwan)

発 表 者 名	発 表 標 題	
松井文彦	光電子ホログラフィーによる3次元局所原子構造・層状物質を例に	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
第29回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウム企画講演 (招待講演)	2016年01月09日 ~ 2016年01月11日	東京大学物性研(千葉県柏市)

発 表 者 名	発 表 標 題	
松井文彦, 西川弘晃, 太田紘志, 大山悦輝, 岸本卓弥, 杉田健治, 嶽大輔, 吉	新たな投影型コリメータ式荷電粒子角度分布・エネルギー分析器の開発	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
日本物理学会第71回年次大会	2016年03月19日 ~ 2016年03月22日	東北学院大学(宮城県仙台市)

(図書) 計(0)件

著 者 名	出 版 社		
書 名	発行年	総ページ数	

## 14. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

(出願) 計(0)件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

(取得) 計(0)件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別
				出願年月日	

## 15. 科研費を使用して開催した国際研究集会

(国際研究集会) 計(0)件

国際研究集会名	開催年月日	開催場所

## 16. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

(1) 国際共同研究: 国際共同研究である

共同研究相手国	相手方研究機関			
France	University of Bordeaux	-	-	-
Germany	European XFEL	-	-	-
Switzerland	University of Zurich	-	-	-
Sweden	MAX IV	-	-	-
U.K.	University of London	-	-	-
他4か国				

## 17. 備考

3D活性サイト科学  
<http://www.3d-activesite.jp/home>  
 3D ACTIVE-SITE SCIENCE  
<http://www.en.3d-activesite.jp/>  
 共同研究国(外4か国): Norwegian Univ. Sci. Technol. (Norway), Gatan Inc. (USA), Aalto University(Finland), Lomonosov Moscow State University(Russia)