

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 22 日現在

機関番号：82118

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2017～2021

課題番号：17H06438

研究課題名(和文)分子系及び半導体系光触媒の動的機能に関する実験・理論解析

研究課題名(英文) Experimental and theoretical analysis of the dynamic function of molecular and semiconductor-based photocatalysts

研究代表者

野澤 俊介(Nozawa, Shunsuke)

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・准教授

研究者番号：20415053

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 64,700,000円

研究成果の概要(和文)：本研究により、光反応性タンパク質や、領域内で合成された多くの均一系・不均一系光触媒について、光エネルギー変換過程における構造・電子状態の過渡的な変化が、X線分子動画法と計算化学的アプローチから可視化され、それらの動的情報はより高効率な光触媒材料を合成する際の設計指針となった。XFELを用いたポンプ-プローブ計測と、放射光を用いたオペランド計測によって、初期の反応経路から反応ダイアグラムが進行する過程まで、幅広い時間スケールの反応中間体が可視化された。光機能性の効率や選択性を決定する因子を、微視的な構造・電子状態の視点から詳細に提示する本研究は、人工光合成研究の新しいアプローチを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高機能な光触媒材料の反応過程を追跡することで、それを模倣して更に良い機能性を持たせるには、素過程としてどのような電子状態・構造を持てばいいのか、このような基本的かつ根本的な問題に対して、構造・局所電子状態の立場から指標を与えられた点に、本研究の学術的意義がある。また、他の計測技術と相補的な比較研究ができ、また、材料開発研究とも密接な連携が行える本研究は、エネルギー問題解決に向けた人工光合成研究の活性化をもたらす点において、大きな社会的意義を持つ。

研究成果の概要(英文)：Transient changes in the structural and electronic states of photoreactive proteins and many homogeneous and heterogeneous photocatalysts were visualized by X-ray molecular imaging and theoretical approaches, and the dynamic information provided design guidelines for synthesizing more efficient photocatalytic materials. Pump-probe measurements using XFEL and operando measurements using synchrotron radiation enabled us to visualize the initial reaction pathway and the progress of the reaction diagram. This artificial photosynthesis study presented a new approach to detail the factors that determine the efficiency and selectivity of photofunctionality from a structural and electronic point of view.

研究分野：放射光科学

キーワード：人工光合成 光触媒 分子動画 XAFS XFEL 放射光 構造解析 その場観察

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

地球温暖化、エネルギーの枯渇は喫緊の課題であり、再生可能エネルギー技術の新規開発が急務となっている。植物の光合成を人工的に実現し、永続的に供給される太陽光エネルギーを化学エネルギーとして分子に蓄える技術「人工光合成」は、この課題に対する現実的な解決方法である。人工光合成を実用化するには、光エネルギーを用いて電子供与体から電子を引き抜き、その電子で二酸化炭素を還元し、一酸化炭素やメタノールといった化学原料や燃料を作る高機能な光触媒の開発が重要な課題である。実用化レベルまで光触媒の機能性を高めるには、光触媒反応を素過程に分解し、光励起状態における構造・電子状態を可視化して、効率向上の阻害要因となっているキャリア再結合のメカニズム、触媒反応活性点、表面・界面における反応機構などについて詳細に理解することが必要である。

これまで、光エネルギー変換プロセスにおける短寿命励起状態に関する基礎的研究は、赤外域から紫外域の短パルスレーザーを用いた超高速光学測定が中心であった。これらの分光学的手法は、光反応過程における構造変化に関する情報については間接的・限定的にしか与えることができない。一方、研究代表者は放射光 X 線のパルス性を生かした時間分解 X 線測定による X 線分子動画法の開拓をこれまで行ってきた。X 線構造解析法の特長である原子レベルでの構造の可視化能力を最大限に生かし、光反応過程において過渡的に生成・消滅する励起状態を測定対象として、その構造そのものを直接観察する画期的な方法である。さらには近年、放射光で培った測定技術を X 線自由電子レーザー(XFEL)で応用することで、フェムト秒領域における X 線分子動画を撮影し、光化学反応過程における分子形成の可視化に成功した。

また、励起状態構造と同じく、光エネルギー変換過程を議論する上で重要な光キャリアについて目を向けてみると、例えば半導体無機化合物に関するキャリア緩和過程についての学理的理解は、まだ非常に限られている。よって、半導体光触媒材料の設計においても、計算化学的アプローチから得られる欠陥や粒界のない化合物固有のキャリア移動度についての知見を用い、高精度な電子状態の動的観測によって得られるキャリアダイナミクスを理解することは、重要である。

2. 研究の目的

人工光合成系の開発研究では、天然光合成システムの基礎的な理解から、実用化人工光合成システムを視野に入れた光機能材料開発まで、多様なサイエンスを取り扱う。野澤はこれまで人工光合成材料における光励起状態の動的構造解析を実施してきたが、構造情報に加えて、電子状態の情報を同時に得ることで光励起状態のキャリアダイナミクスを、より詳細に議論できることが分かってきた。加えて、解析においては理論計算との連携も重要であり、例えば、測定データからいくつかの構造パラメータを決め、それを元に計算された励起構造モデルを用いて最適化を行うことで、より正確で詳細な励起状態構造を得ることができるとも判明してきた。このような研究成果を踏まえて、励起状態の構造情報に加え、電子状態の情報も同時計測可能な測定システムを新たに構築し、加えて分担研究者の山下が行う理論計算と密接に連携することで、人工光合成系の開発研究が取り扱う幅広い分野に X 線分子動画撮影法を適応させる本研究の着想に至った。また、山下は、これまで電荷分離状態を取り扱った理論計算を精力的に進めており、有機金属ペロブスカイトや d^0 型・ d^{10} 型光触媒材料について、電子構造および結晶構造がキャリアの緩和時間に及ぼす影響を明らかにすることに成功している。これらを広く応用するため、山下は本研究において計算化学的な領域内共同研究を実施し、水分解光触媒の材料として期待されている一連の遷移金属酸化物や酸窒化合物についてキャリア緩和とキャリア移動度の競合から材料のスクリーニングを行い、新規材料探索を展開する。

本研究の目的は人工光合成材料の光エネルギー変換過程における構造・電子状態の過渡的な変化を、X 線分子動画法と計算化学的アプローチから可視化し、その動的情報から新機能を持った材料開発に対して設計指針を与えることである。本研究で提案する X 線分子動画法は電子状態・構造の変化をフェムト秒の時間領域まで実時間計測することが可能であり、量子化学計算を用いて精密な構造最適化を行うことで、光機能性の効率や選択性を決定する因子を、微視的な構造・電子状態の視点から詳細に提示していく。

3. 研究の方法

本研究は領域内における計測班としての役割を担う。野澤は動的 X 線測定の専門家として、理論計算を行う山下と連携し、領域内で扱われる材料の光反応過程について構造・化学状態の可視化を行う。領域研究のスタート時から以下の課題について検討する。

1. 金属錯体を用いた均一系光触媒：光機能性の高性能化を目指した光反応中の過渡的な構造・電子状態の可視化

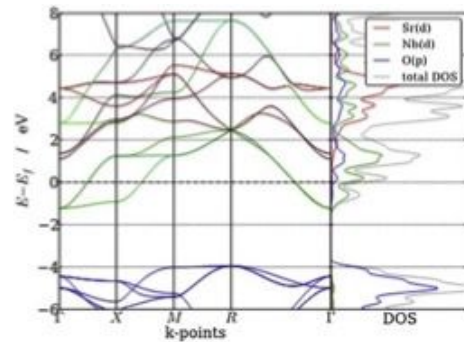
2. 半導体光触媒：光キャリア生成状態における化学状態・構造決定。キャリアトラップサイトに注目した電子状態・構造決定
3. 光応答性タンパク質：価数選択 X 線分光法を用いた PSII 内 Mn4Ca クラスターの動的な化学状態観測、

また、山下は人工光合成技術を“相界面光誘起素過程”の観点からとらえ、人工光合成材料で求められる相界面光誘起素過程の制御と最適化について理論化学・計算化学的アプローチに基づいて研究を実施する。相界面における光誘起素過程として『エキシトンの生成と解離』、また『生成したキャリアの緩和過程』に注目し、電子構造論・反応論に基づいた分子レベルの基礎学理を確立し、さらに超高速計算に基づく計算科学により、具体的に水分解光触媒材料を取り上げ、エネルギー変換計算科学を推進し、高効率光エネルギー変換に向けた高機能相界面を探索・創出する。

4. 研究成果

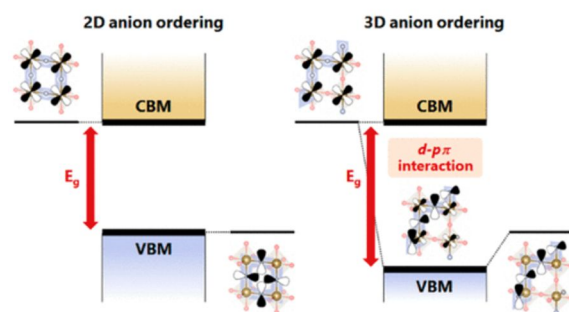
- (1) 第一原理計算による欠陥型 SrNbO₃ の可視光吸収の研究 [*J. Photochemistry & Photobiology A: Chemistry*, **375**, 175–180 (2018)]

本研究では、d¹ 金属ストロンチウムニオブ酸塩 SrNbO₃ の電子状態と光吸収スペクトルを理論的に調べ、実験的に 1.9eV の光学ギャップに見られる可視光吸収について、深い知見を得ることを目的とした。数値計算の結果、この光学ギャップはバンド間 CB B-1 遷移に対応することがわかった。さらに、SrNbO₃ のような d¹ 型の光触媒は、フェルミ面上の対称性の低い k 点からの光学的寄与が、対称性の高い k 点からの寄与よりも大きいという特殊なケースであることが判明した。よく研究されている Sr 欠陥のみを持つ Sr_{1-x}NbO₃ と Sr 欠陥と O 空孔の両方を持つ Sr_{1-x}NbO_{3-x} の比較研究から、後者は Sr 欠陥の量に対する光学ギャップの実験依存性を再現し、後者の光吸収強度は前者のそれよりも大きいことが示唆された。



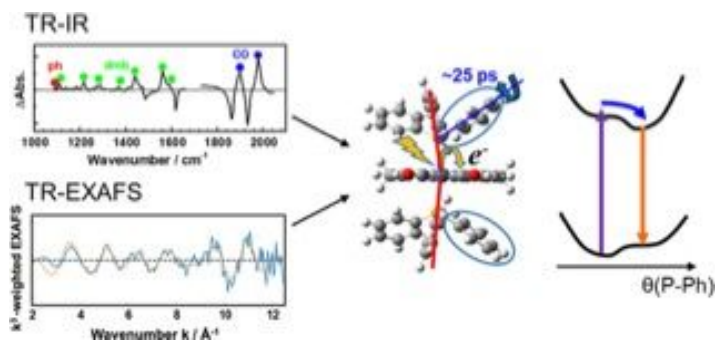
- (2) CaTaO₂N のアニオン秩序化：光触媒活性に及ぼす構造的影響を第一原理計算から洞察 [*Chemistry of Materials*, **29**, 539-545 (2017)]

本研究では、CaTaO₂N の化学組成が同じで陰イオン配列が異なるいくつかの陰イオン配列モデルを調べ、その化学的・物理的特徴を比較した。その結果、価電子帯構造はアニオン配列の違いによって変化し、バンドギャップ、キャリア有効質量、バンド端位置などの光触媒関連特性に大きな影響を与えることを見出した。詳細には、2次元のものと比較すると、3次元のアニオンオーダーはより正の価電子帯最大位置を持ち、酸素発生反応に適した条件であることがわかった。電子構造解析の結果、価電子帯構造の違いは、Ta 5d バンドと N 2p バンドの軌道の重なり (d-p 相互作用) の違いに起因することがわかった。これは、2次元のアニオン秩序では対称性の不一致により重なることができないが、3次元アニオン秩序では N 2p バンドの対称性が低く、Ta 5d バンドと重なり、価電子帯の純安定化を引き起こすことができるためである。



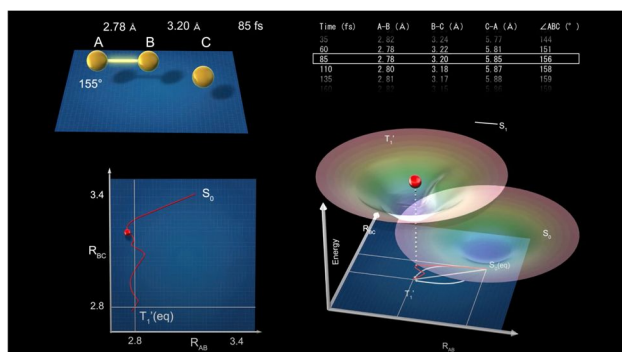
- (3) CO₂ 光還元触媒 Re(I)錯体における時間分解 IR / XAFS 分光法を用いた励起状態構造および光物性決定 [*Inorganic Chemistry*, **60**, 7773-7784 (2021).]

アセトニトリル溶液中の2種類のレニウム(I)ジイミン錯体について、時間分解 IR / XAFS 分光法を用いて測定し、量子化学計算を用いて解釈した。これらの錯体の違いは、ホスフィン配位子のフェニル基の数であり、これは中心の Re(I)に間接的に影響を与えるだけである。このわずかな違いにもかかわらず、これらの錯体は発光波長と励起状態寿命に大きな違いを示す。光励起により、両錯体とも Re-P の結合長と P-Re-P の角度が大きく変化し、(3,3)のみフェニル基が約 20° 大きく回転していることがわかった。一方、光励起により Re からピピリジン配位子への電荷移動が起こる場合、フェニル基上の電荷分布にはほとんど変化がない。このことから、フェニル基とジイミンの立体障害による不安定性が、(3,3)の最低励起三重項状態(T₁)のストークスシフトを小さくしていることがわかった。また、基底状態と励起状態の間の大きな構造変化により、(3,3)の T₁ の寿命が長くなっていることもわかった。



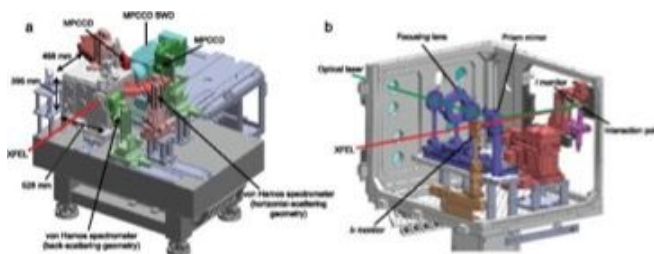
- (4) 溶液中分子の光化学反応における反応経路の直接観測 [*Nature*, **582**, 520 -524 (2020).]

化学反応の基礎研究では、計算または提案されたポテンシャルエネルギー曲面を用いて、反応座標に沿った分子ダイナミクスを考察することが多い。しかし、すべての核運動を時間分解で追跡すること、すなわち波束の運動を実験的に完全にマッピングすることは困難であり、A-B + C → A + B-C という単純な立体二分子反応においてさえ、まだ実現されていない。本研究では、水溶液中の金三量体錯体[Au(CN)₂]₃の光誘起結合形成過程におけるこれらの波束振動の軌道を、X線自由電子レーザーを用いたフェムト秒 X線溶液散乱で追跡した。3つのモノマーA, B, Cが非共有結合でクラスター化した複合体では、AとBの間の距離はBとCの間の距離より短い。この波束を3次元核座標で追跡すると、光励起後最初の60フェムト秒でAとBの間に共有結合が形成され、A-B + Cが得られる。その後、360フェムト秒でBとCの間に2番目の共有結合が形成されて、線状の共有結合を持つ3量体A-B-Cとなることが明らかになった。また、この三量体において観測された波束振動を、我々は実験データのみを用いて明確にアサインした。原理的には、より高強度のX線を用いれば、金のような散乱性の高い原子だけでなく、炭素や窒素のような軽い原子の運動も可視化でき、多くの化学反応に関わる原子運動を直接追跡する道が開かれることになる。



- (5) 光応答性タンパク質における、電子構造と構造の同時計測システムの開発 [*Structural Dynamics* **6**, 054302 (2019)]

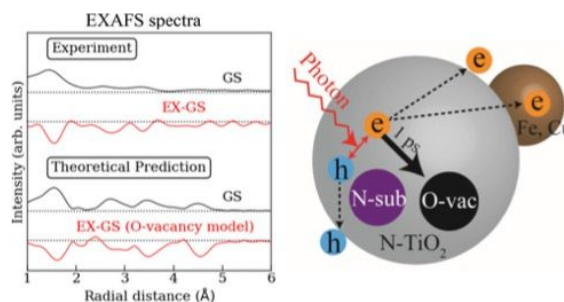
光応答性タンパク質の局所電子構造と構造情報を同時に得るために、X線自由電子レーザーを用いた超高速ポンプ・プローブ実験に特化した実験システム SPINETT (SACLA Pump-probe Instrument for Tracking Transient dynamics) を開発した。SPINETTは、1気圧の



ヘリウム圧力下で動作するチャンバー、2 台の Von Hamos スペクトロメーター、短い作業距離を持つ大型 2 次元検出器から構成されている。このプラットフォームでは、時分割 X 線吸収分光、時分割 X 線発光分光、時分割 X 線散漫散乱などの X 線補完計測を行うことができる。実際に、低粘度マトリックスに埋め込まれたタンパク質微結晶のサンプルを用いたテスト実験を SACLA で実施し、SPINETT が金属電子状態とタンパク質構造を同時に得ることができることを実証した。

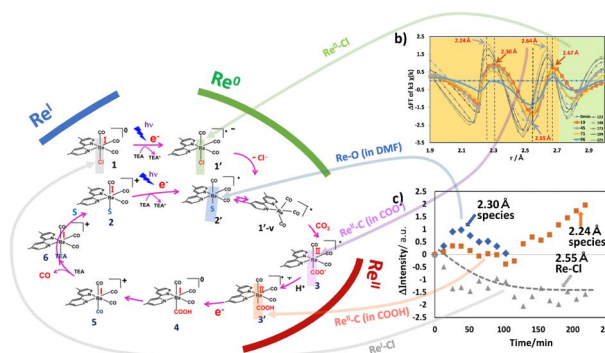
- (6) 光励起窒素ドーパチタン酸化物における電荷トラップ過程 [Inorganic Chemistry, **59**, 10439-10449 (2020).]

窒素ドーパチタン酸化物 (N-TiO₂) において、光励起後に起こる電荷トラップによる構造変化に関する第一原理計算を行った。Ti 原子の電荷トラッピングサイトとそれに対応する K 端 EXAFS スペクトルを予測し、紫外光励起下で得られた実験結果と比較した。その結果、電荷捕獲は酸素空孔(O-vac)サイトの近傍で起こることが示された。さらに、O-vac サイトは EXAFS スペクトルに大きな影響を与えるが、O-vac サイト近傍の酸素サイトに窒素を置換した場合は EXAFS スペクトルに影響を与えないことを計算で明らかにした。この観測とこれまでの実験から得られた知見から、紫外光励起電子はバルクの O-vac サイトを移動し(約 300 ps)、可視光励起電子 (N 2p → Ti 3d) は N サイトに隣接する O-vac サイトに直ちにトラップされる(約 1 ps)電荷トラップ過程を提案した。



- (7) レニウムジメチルピリジン錯体触媒による二酸化炭素の光還元機構；XAFS および FT-IR によるオペランド測定 [Journal of Catalysis, **405**, 508-519 (2022).]

fac-Re(dmbpy)(CO)₃Cl を触媒とする CO₂ の光還元反応を XAFS とレーザーフラッシュ FT-IR 過渡分光のオペランド測定により精密に調べた。光反応の初期には、ペンタ配位錯体 [Re⁰(dmbpy)(CO)₃] として割り当てられた Re⁰ 種が出現し、XAFS 測定では、Re^{II} 種 [Re^{II}(dmbpy)(CO)₃CO₂] (3)/[Re^{II}(dmbpy)(CO)₃COOH]⁺ (3) が遅延的に上昇することが観測された。触媒サイクルの中で Re 中心の価数が Re^I Re⁰ Re^{II} と変化していることから、Re⁰ 中心に CO₂ が酸化的に付加していることが明らかになった。レーザーフラッシュ誘起 FT-IR 測定では、3 の上昇と減衰に続いて、3 の遅延上昇と減衰が観測された。トリエチルアミンの炭素ラジカルから 3 への 2 回目の電子移動により、[Re^I(dmbpy)(CO)₄]⁺ から [Re^I(dmbpy)COOH] が生成されることがわかった。この触媒サイクルの律速段階は、3 から 3 を生成するプロトン化過程であることが明らかにされた。



5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計52件（うち査読付論文 37件／うち国際共著 9件／うちオープンアクセス 11件）

1. 著者名 Kou Y., Nabetani Y., Nakazato R., Pratheesh N.V., Sato T., Nozawa S., Adachi S.-I., Tachibana H., Inoue H.	4. 巻 405
2. 論文標題 Mechanism of the photoreduction of carbon dioxide catalyzed by the benchmarking rhenium dimethylbipyridine complexes; operando measurements by XAFS and FT-IR	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Catalysis	6. 最初と最後の頁 508
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcat.2021.11.020	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Harada K., Funamori N., Yamamoto N., Shimosaki Y., Shimada M., Miyajima T., Umemori K., Sakai H., Nakamura N., Sakanaka S., Kobayashi Y., Honda T., Nozawa S., Nakao H., Niwa Y., Wakabayashi D., Amemiya K., Igarashi N.	4. 巻 29
2. 論文標題 Conceptual design of the Hybrid Ring with superconducting linac	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Synchrotron Radiation	6. 最初と最後の頁 118
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S1600577521012753	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Tanahashi Y., Takahashi K., Tsubonouchi Y., Nozawa S., Adachi S.-I., Hirahara M., Mohamed E.A., Zahran Z.N., Saito K., Yui T., Yagi M.	4. 巻 118
2. 論文標題 Mechanism of H ⁺ dissociation-induced O-O bond formation via intramolecular coupling of vicinal hydroxo ligands on low-valent Ru(III) centers	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America	6. 最初と最後の頁 e2113910118
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1073/pnas.2113910118	査読の有無 有
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	国際共著 -
1. 著者名 Tsukahara T., An S., Otsuru S., Tezuka Y., Nozawa S., Adachi J., Akashi K., Inagaki Y., Kawae T., Ishii H., Liao Y.-F., Kida T., Suehiro S., Nantoh M., Ishibashi K., Ishiwata Y.	4. 巻 130
2. 論文標題 Correlation between ferromagnetism and dopant 3 d metal-oxygen hybridized state lying at the bottom of conduction band in ZnO-based diluted magnetic semiconductor system	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 243904
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0066697	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Suzuki H., Higashi M., Tomita O., Ishii Y., Yamamoto T., Kato D., Kotani T., Ozaki D., Nozawa S., Nakashima K., Fujita K., Saeki A., Kageyama H., Abe R.	4. 巻 33
2. 論文標題 PbBi3O4X3 (X = Cl, Br) with Single/Double Halogen Layers as a Photocatalyst for Visible-Light-Driven Water Splitting: Impact of a Halogen Layer on the Band Structure and Stability	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 9580
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.1c02876	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Tezuka Y., Nozawa S., Nakajima N., Iwazumi T.	4. 巻 104
2. 論文標題 Temperature dependence of electronic structure on the ferroelectric phase transition of BaTiO3	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235148
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.235148	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Gu J., Lee S., Eom S., Ki H., Choi E.H., Lee Y., Nozawa S., Adachi S.-I., Kim J., Ihee H.	4. 巻 22
2. 論文標題 Structural dynamics of c2f4i2 in cyclohexane studied via time-resolved x-ray liquidography	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 International Journal of Molecular Sciences	6. 最初と最後の頁 9793
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/ijms22189793	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Mogi H., Kato K., Yasuda S., Kanazawa T., Miyoshi A., Nishioka S., Oshima T., Tang Y., Yokoi T., Nozawa S., Yamakata A., Maeda K.	4. 巻 33
2. 論文標題 Control of the Photocatalytic Activity of Metastable Layered Oxynitride K2LaTa2O6N through Topochemical Transformation of Tuned Oxide Precursors	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 6443
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.1c01726	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Yano R., Yoshida M., Tsunenari T., Sato-Tomita A., Nozawa S., Iida Y., Matsunaga N., Kobayashi A., Kato M.	4. 巻 50
2. 論文標題 Vapochromic behaviour of a nickel(ii)-quinonoid complex with dimensional changes between 1D and higher	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 8696
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1dt00269d	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Takagi S., Inukai K., Kawai N., Nozawa S., Kyono A., Fukaya R., Adachi S.-I., Ichiyanagi K.	4. 巻 118
2. 論文標題 Visualization of transformation toughening of zirconia ceramics during dynamic fracture	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 231901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0044607	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Shimoda Y., Miyata K., Funaki M., Ehara T., Morimoto T., Nozawa S., Adachi S.-I., Ishitani O., Onda K.	4. 巻 60
2. 論文標題 Determining Excited-State Structures and Photophysical Properties in Phenylphosphine Rhenium(I) Diimine Biscarbonyl Complexes Using Time-Resolved Infrared and X-ray Absorption Spectroscopies	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 7773
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.1c00146	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Chang J., Baek Y., Lee I., Sekiguchi H., Ichiyanagi K., Mio K., Nozawa S., Fukaya R., Adachi S.-I., Kuramochi M., Sasaki Y.C.	4. 巻 556
2. 論文標題 Diffracted X-ray blinking measurements of interleukin 15 receptors in the inner/outer membrane of living NK cells	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Biochemical and Biophysical Research Communications	6. 最初と最後の頁 53
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bbrc.2021.03.144	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Kim Hanui, Kim Jong Goo, Kim Tae Wu, Lee Sang Jin, Nozawa Shunsuke, Adachi Shin-ichi, Yoon Kihwan, Kim Joonghan, Ihee Hyotcherl	4. 巻 12
2. 論文標題 Ultrafast structural dynamics of in-cage isomerization of diiodomethane in solution	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 2114 ~ 2120
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0SC05108J	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Chang Jaewon, Baek Yonugseok, Lee Injee, Sekiguchi Hiroshi, Ichianagi Kouhei, Mio Kazuhiro, Nozawa Shunsuke, Fukaya Ryo, Adachi Shin-ichi, Kuramochi Masahiro, Sasaki Yuji C.	4. 巻 556
2. 論文標題 Diffracted X-ray blinking measurements of interleukin 15 receptors in the inner/outer membrane of living NK cells	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Biochemical and Biophysical Research Communications	6. 最初と最後の頁 53 ~ 58
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bbrc.2021.03.144	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Watanabe Kenta, Iwashina Katsuya, Iwase Akihito, Nozawa Shunsuke, Adachi Shin-ichi, Kudo Akihiko	4. 巻 32
2. 論文標題 New Visible-Light-Driven H ₂ - and O ₂ -Evolving Photocatalysts Developed by Ag(I) and Cu(I) Ion Exchange of Various Layered and Tunneling Metal Oxides Using Molten Salts Treatments	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 10524 ~ 10537
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.0c03461	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Uemura Yohei, Yokoyama Toshihiko, Katayama Tetsuo, Nozawa Shunsuke, Asakura Kiyotaka	4. 巻 10
2. 論文標題 Tracking the Local Structure Change during the Photoabsorption Processes of Photocatalysts by the Ultrafast Pump-Probe XAFS Method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Sciences	6. 最初と最後の頁 7818 ~ 7818
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/app10217818	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Takagi Sota, Kyono Atsushi, Nozawa Shunsuke, Kawai Nobuaki, Inukai Koji, Fukaya Ryo, Funamori Nobumasa, Adachi Shin-ichi, Ichiyanaagi Kouhei	4. 巻 47
2. 論文標題 In Situ Observation of the Phase Transition Behavior of Shocked Baddeleyite	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Geophysical Research Letters	6. 最初と最後の頁 1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1029/2020GL089592	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Mio Kazuhiro, Ishihara Masaki, Fujimura Shoko, Sasaki Daisuke, Nozawa Shunsuke, Ichiyanaagi Kouhei, Fukaya Ryo, Adachi Shin-ichi, Kuramochi Masahiro, Sekiguchi Hiroshi, Kubo Tai, Sasaki Yuji C.	4. 巻 529
2. 論文標題 X-ray-based living-cell motion analysis of individual serotonin receptors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Biochemical and Biophysical Research Communications	6. 最初と最後の頁 306 ~ 313
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.bbrc.2020.05.200	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Sato Kosuke, Yamanaka Ken-ichi, Nozawa Shunsuke, Fukuzawa Hironobu, Katayama Tetsuo, Morikawa Takeshi, Nonaka Takamasa, Dohmae Kazuhiko, Ueda Kiyoshi, Yabashi Makina, Asahi Ryoji	4. 巻 59
2. 論文標題 Charge Trapping Process in Photoexcited Nitrogen-Doped Titanium Oxides	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 10439 ~ 10449
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.0c00696	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Kim Jong Goo, Nozawa Shunsuke, et al.	4. 巻 582
2. 論文標題 Mapping the emergence of molecular vibrations mediating bond formation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nature	6. 最初と最後の頁 520 ~ 524
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41586-020-2417-3	査読の有無 有
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	国際共著 該当する

1. 著者名 Kanazawa Tomoki, Kato Kosaku, Yamaguchi Ryusei, Uchiyama Tomoki, Lu Daling, Nozawa Shunsuke, Yamakata Akira, Uchimoto Yoshiharu, Maeda Kazuhiko	4. 巻 10
2. 論文標題 Cobalt Aluminate Spinel as a Cocatalyst for Photocatalytic Oxidation of Water: Significant Hole-Trapping Effect	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 4960 ~ 4966
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.0c00944	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takagi Sota, Ichiyangi Kouhei, Kyono Atsushi, Nozawa Shunsuke, Kawai Nobuaki, Fukaya Ryo, Funamori Nobumasa, Adachi Shin-ichi	4. 巻 27
2. 論文標題 Development of shock-dynamics study with synchrotron-based time-resolved X-ray diffraction using an Nd:glass laser system	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Synchrotron Radiation	6. 最初と最後の頁 371 ~ 377
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S1600577519016084	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Kanazawa Tomoki, Eguchi Miharuru, Nozawa Shunsuke, Maeda Kazuhiko	4. 巻 93
2. 論文標題 Improved Electrochemical Water Oxidation over Chromium-Substituted Cobalt Aluminate Spinels	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 13 ~ 19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20190272	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Takagi Sota, Ichiyangi Kouhei, Kyono Atsushi, Nozawa Shunsuke, Kawai Nobuaki, Fukaya Ryo, Funamori Nobumasa, Adachi Shin-ichi	4. 巻 27
2. 論文標題 Development of shock-dynamics study with synchrotron-based time-resolved X-ray diffraction using an Nd:glass laser system	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Synchrotron Radiation	6. 最初と最後の頁 371 ~ 377
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S1600577519016084	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Kanazawa Tomoki, Kato Kosaku, Yamaguchi Ryusei, Uchiyama Tomoki, Lu Daling, Nozawa Shunsuke, Yamakata Akira, Uchimoto Yoshiharu, Maeda Kazuhiko	4. 巻 10
2. 論文標題 Cobalt Aluminate Spinel as a Cocatalyst for Photocatalytic Oxidation of Water: Significant Hole-Trapping Effect	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 4960 ~ 4966
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.0c00944	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Kanazawa Tomoki, Eguchi Miharuru, Nozawa Shunsuke, Maeda Kazuhiko	4. 巻 93
2. 論文標題 Improved Electrochemical Water Oxidation over Chromium-Substituted Cobalt Aluminate Spinels	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 13 ~ 19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20190272	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Koide Akihiro, Uemura Yohei, Yokoyama Toshihiko, Asakura Kiyotaka, et al.	4. 巻 22
2. 論文標題 Photoinduced anisotropic distortion as the electron trapping site of tungsten trioxide by ultrafast W L1-edge X-ray absorption spectroscopy with full potential multiple scattering calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 2615 ~ 2621
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP01332F	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Takagi Sota, Ichiyangi Kouhei, Kyono Atsushi, Nozawa Shunsuke, Kawai Nobuaki, Fukaya Ryo, Funamori Nobumasa, Adachi Shin-ichi	4. 巻 27
2. 論文標題 Development of shock-dynamics study with synchrotron-based time-resolved X-ray diffraction using an Nd:glass laser system	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Synchrotron Radiation	6. 最初と最後の頁 371 ~ 377
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S1600577519016084	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Ichiyanagi Kouhei, Takagi Sota, Kawai Nobuaki, Fukaya Ryo, Nozawa Shunsuke, Nakamura Kazutaka G., Liss Klaus-Dieter, Kimura Masao, Adachi Shin-ichi	4. 巻 9
2. 論文標題 Microstructural deformation process of shock-compressed polycrystalline aluminum	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 7604
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-43876-2	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Hada Masaki, Miyata Kiyoshi, Koshihara Shin-ya, Hayashi Yasuhiko, Nishina Yuta, et al.	4. 巻 13
2. 論文標題 Selective Reduction Mechanism of Graphene Oxide Driven by the Photon Mode versus the Thermal Mode	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Nano	6. 最初と最後の頁 10103 ~ 10112
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsnano.9b03060	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Shibata Kengo, Kato Kosaku, Tsonis Constantine, Kanazawa Tomoki, Lu Daling, Nozawa Shunsuke, Yamakata Akira, Ishitani Osamu, Maeda Kazuhiko	4. 巻 34
2. 論文標題 Synthesis of Copolymerized Carbon Nitride Nanosheets from Urea and 2 Aminobenzonitrile for Enhanced Visible Light CO ₂ Reduction with a Ruthenium(II) Complex Catalyst	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Solar RRL	6. 最初と最後の頁 1900461 ~ 1900461
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/solr.201900461	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Katayama Tetsuo, Nozawa Shunsuke, Umeta Yasufumi, Lee SungHee, Togashi Tadashi, Owada Shigeki, Yabashi Makina	4. 巻 6
2. 論文標題 A versatile experimental system for tracking ultrafast chemical reactions with X-ray free-electron lasers	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Structural Dynamics	6. 最初と最後の頁 054302 ~ 054302
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5111795	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Katayama Tetsuo, Penfold Thomas J., et al.	4. 巻 10
2. 論文標題 Tracking multiple components of a nuclear wavepacket in photoexcited Cu(I)-phenanthroline complex using ultrafast X-ray spectroscopy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 3606
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-019-11499-w	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Ishizuka Tomoya, Kogawa Taichi, Makino Misaki, Shiota Yoshihito, Ohara Kazuaki, Kotani Hiroaki, Nozawa Shunsuke, Adachi Shin-ichi, Yamaguchi Kentaro, Yoshizawa Kazunari, Kojima Takahiko	4. 巻 58
2. 論文標題 Formation of a Ruthenium(V)-Imido Complex and the Reactivity in Substrate Oxidation in Water through the Nitrogen Non-Rebound Mechanism	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 12815 ~ 12824
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.9b01781	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Kitamoto Yuichi, Pan Ziyang, Prabhu Deepak D., Isobe Atsushi, Ohba Tomonori, Shimizu Nobutaka, Takagi Hideaki, Haruki Rie, Adachi Shin-ichi, Yagai Shiki	4. 巻 10
2. 論文標題 One-shot preparation of topologically chimeric nanofibers via a gradient supramolecular copolymerization	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 4578
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-019-12654-z	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Suzuki Atsuhito, Aratsu Keisuke, Datta Sougata, Shimizu Nobutaka, Takagi Hideaki, Haruki Rie, Adachi Shin-ichi, Hollamby Martin, Silly Fabien, Yagai Shiki	4. 巻 141
2. 論文標題 Topological Impact on the Kinetic Stability of Supramolecular Polymers	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 13196 ~ 13202
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b06029	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Matsukawa Hiroki, Yoshida Masaki, Tsunenari Takahiro, Nozawa Shunsuke, Sato-Tomita Ayana, Maegawa Yoshifumi, Inagaki Shinji, Kobayashi Atsushi, Kato Masako	4. 巻 9
2. 論文標題 Fast and stable vapochromic response induced through nanocrystal formation of a luminescent platinum(II) complex on periodic mesoporous organosilica	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 15151
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-51615-w	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Kenta, Iwase Akihiko, Nozawa Shunsuke, Adachi Shin-ichi, Kudo Akihiko	4. 巻 7
2. 論文標題 Effects of Coapplication of Rh-Doping and Ag-Substitution on the Band Structure of Li ₂ TiO ₃ and the Photocatalytic Property	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Sustainable Chemistry & Engineering	6. 最初と最後の頁 9881 ~ 9887
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acssuschemeng.9b00513	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Park Sungjun, Choi Jungkweon, Ki Hosung, Kim Kyung Hwan, Oang Key Young, Roh Heegwang, Kim Joonghan, Nozawa Shunsuke, Sato Tokushi, Adachi Shin-ichi, Kim Jeongho, Ihee Hyotcherl	4. 巻 150
2. 論文標題 Fate of transient isomer of CH ₂ I ₂ : Mechanism and origin of ionic photoproducts formation unveiled by time-resolved x-ray liquidography	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 224201 ~ 224201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5099002	査読の有無 無
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	国際共著 -

1. 著者名 Yang Cheolhee, Choi Minseo, Kim Jong, Kim Hanui, Muniyappan Srinivasan, Nozawa Shunsuke, Adachi Shin-ichi, Henning Robert, Kosheleva Irina, Ihee Hyotcherl	4. 巻 19
2. 論文標題 Protein Structural Dynamics of Wild-Type and Mutant Homodimeric Hemoglobin Studied by Time-Resolved X-Ray Solution Scattering	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 International Journal of Molecular Sciences	6. 最初と最後の頁 3633 ~ 3633
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/ijms19113633	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 H. T. Lemke, S. Adachi, M. M. Nielsen, et al.	4. 巻 3
2. 論文標題 Tuning and Tracking of Coherent Shear Waves in Molecular Films	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 9929 ~ 9933
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.8b01400	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Prabhu Deepak D., Aratsu Keisuke, Kitamoto Yuichi, Ouchi Hayato, Ohba Tomonori, Hollamby Martin J., Shimizu Nobutaka, Takagi Hideaki, Haruki Rie, Adachi Shin-ichi, Yagai Shiki	4. 巻 4
2. 論文標題 Self-folding of supramolecular polymers into bioinspired topology	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 eaat8466
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.aat8466	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Maeda Kazuhiko, An Daehyeon, Kumara Ranasinghe Chandana Sampath, Uchiyama Tomoki, Kuriki Ryo, Kanazawa Tomoki, Lu Daling, Nozawa Shunsuke, Yamakata Akira, Uchimoto Yoshiharu, Ishitani Osamu	4. 巻 6
2. 論文標題 Visible-light CO ₂ reduction over a ruthenium(ii)-complex/C ₃ N ₄ hybrid photocatalyst: the promotional effect of silver species	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry A	6. 最初と最後の頁 9708 ~ 9715
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8TA03245A	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Miyoshi Akinobu, Vequzo Junie Jhon?M., Nishioka Shunta, Kato Yuma, Yamamoto Muneaki, Yamashita Shunsuke, Yokoi Toshiyuki, Iwase Akihideo, Nozawa Shunsuke, Yamakata Akira, Yoshida Tomoko, Kimoto Koji, Kudo Akihiko, Maeda Kazuhiko	4. 巻 2
2. 論文標題 Nitrogen/fluorine-codoped rutile titania as a stable oxygen-evolution photocatalyst for solar-driven Z-scheme water splitting	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Sustainable Energy & Fuels	6. 最初と最後の頁 2025 ~ 2035
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8SE00191J	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Kanazawa Tomoki、Nozawa Shunsuke、Lu Daling、Maeda Kazuhiko	4. 巻 9
2. 論文標題 Structure and Photocatalytic Activity of PdCrOx Cocatalyst on SrTiO3 for Overall Water Splitting	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Catalysts	6. 最初と最後の頁 59 ~ 59
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/catal9010059	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Masanori、Fujii Mikiya、Hisatomi Takashi、Yamashita Koichi、Domen Kazunari	4. 巻 36
2. 論文標題 Regression model for stabilization energies associated with anion ordering in perovskite-type oxynitrides	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Energy Chemistry	6. 最初と最後の頁 7 ~ 14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jechem.2019.01.012	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Kaneko Masanori、Mishima Kenji、Yamashita Koichi	4. 巻 375
2. 論文標題 First-principles study on visible light absorption of defected SrNbO3	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry	6. 最初と最後の頁 175 ~ 180
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jphotochem.2019.02.018	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 A. Koide, Y. Uemura, D. Kido, Y. Wakisaka, S. Takakusagi, B. Ohtani, Y. Niwa, S. Nozawa, T. Yokoyama*, K. Asakura*, et al.	4. 巻 印刷中
2. 論文標題 Photoinduced anisotropic distortion as the electron trapping site of tungsten trioxide by ultrafast W L1-edge X-ray absorption spectroscopy with full potential multiple scattering calculations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 印刷中
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP01332F	査読の有無 有
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	国際共著 該当する

1. 著者名 Watanabe Kenta, Iwase Akihideo, Nozawa Shunsuke, Adachi Shin-ichi, Kudo Akihiko	4. 巻 印刷中
2. 論文標題 Effects of Coapplication of Rh-Doping and Ag-Substitution on the Band Structure of Li ₂ TiO ₃ and the Photocatalytic Property	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Sustainable Chemistry & Engineering	6. 最初と最後の頁 印刷中
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acssuschemeng.9b00513	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Akihideo Iwase, Shunsuke Nozawa, Shin-ichi Adachi, Akihiko Kudo	4. 巻 353
2. 論文標題 Preparation of Mo- and W-doped BiVO ₄ fine particles prepared by an aqueous route for photocatalytic and photoelectrochemical O ₂ evolution	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Photochemistry and Photobiology. A, 353 (2018) 284.	6. 最初と最後の頁 284-291
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jphotochem.2017.11.025	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 Takahiko Kojima, Fumiya Ogishima, Takahisa Nishibu, Hiroaki Kotani, Tomoya Ishizuka, Toshihiro Okajima, Shunsuke Nozawa, Yoshihito Shiota, Kazunari Yoshizawa, Hiroyoshi Ohtsu, Masaki Kawano, Takuya Shiga, and Hiroki Oshio	4. 巻 印刷中
2. 論文標題 Intermediate-Spin Iron(III) Complexes Having a Redox-Noninnocent Macrocyclic Tetraamido Ligand	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Inorg. Chem.	6. 最初と最後の頁 印刷中
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.8b00037	査読の有無 有
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	国際共著 -

1. 著者名 A. Kubo, G. Giorgi, K. Yamashita	4. 巻 29
2. 論文標題 MgTaO ₂ N Photocatalysts: Perovskite vs. Ilmenite Structure. A Theoretical Investigation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 539-545
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b08874	査読の有無 有
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	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計32件（うち招待講演 15件 / うち国際学会 13件）

1. 発表者名 野澤俊介
2. 発表標題 XFEL を用いたフェムト秒 X 線溶液散乱による光化学反応中の反応経路の可視化
3. 学会等名 第34回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S. Nozawa
2. 発表標題 Short- and long-term requirements from users
3. 学会等名 SACLA Users' Meeting 2021（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 三好亮暢, 金澤知器, 野澤俊介, 前田和彦
2. 発表標題 ZnF ₂ を用いた低温窒化反応によるGa _N -ZnO固溶体類似化合物の合成とその光触媒活性
3. 学会等名 第127回触媒討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 手塚泰久, 高橋瑞樹, 浅利真人, 加藤梨紗, 野澤俊介, 中島伸夫, 岩住俊明
2. 発表標題 共鳴X線ラマン散乱による遷移金属酸化物の非占有電子構造の研究
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 三好亮暢, Junie Jhon M. Vequizo, 西岡駿太, 山下俊介, 野澤俊介, 桑原彰秀, 山方啓, 木本浩司, 前田和彦
2. 発表標題 窒素/フッ素共ドーブルチル型TiO ₂ を用いた可視光Zスキーム水分解系の構築
3. 学会等名 日本化学会第101回春季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高橋瑞樹, 浅利真人, 加藤梨沙, 野澤俊介, 中島伸夫, 岩住俊明, 手塚泰久
2. 発表標題 共鳴 X 線ラマン散乱による Ti 酸化物の電子構造の研究
3. 学会等名 第34回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 恒成高弘, 吉田将己, 佐藤文菜, 野澤俊介, 小林厚志, 加藤昌子
2. 発表標題 メソポーラス材料に担持した発光性白金(II)錯体の蒸気応答
3. 学会等名 錯体化学会 第70回討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Suenobu, M. Suzuki, K. Nakayama, H. Sei, N. Tohnai, K. Ichianagi, A S. Tomita, S. Nozawa, T tachikawa, T. Iwasa, H. Kasai, E. Nihibori, K. Kto, T. Seki, H. Ito
2. 発表標題 配位子にアントラセン部位を有する金(I)錯体結晶のOFF-ON-OFF型発光応答フォトクロミズム
3. 学会等名 2020年web光化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小谷哲, 小川幹太, 鈴木肇, 富田修, 野澤俊介, 山方啓, 坂本良太, 阿部竜
2. 発表標題 貴金属およびCr 種の共担持によるオキシハライド光触媒の水素生成活性向上
3. 学会等名 第126回触媒討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 金澤知器, 内山智貴, 内本喜晴, 山方啓, 野澤俊介, 前田和彦
2. 発表標題 CoAl ₂ O ₄ ナノ粒子を助触媒とした光触媒的な水の酸化反応
3. 学会等名 第126回触媒討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高木壮大, 興野純, 野澤俊介, 川合伸明, 犬飼浩之, 深谷亮, 船守展正, 足立伸一, 一柳光平
2. 発表標題 In situ observation of phase transition behavior of shocked baddeleyite
3. 学会等名 JpgU-AGU Joint Meeting 2020 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S. Nozawa, R. Fukaya, K. Ichianagi, T. Sato, and S. Adachi
2. 発表標題 Ultrafast Studies of Photoreaction Dynamics in Artificial Photosynthesis Systems by Time-Resolved XAFS
3. 学会等名 3rd International Solar Fuels Conference (ISF-3), International Conference on Artificial Photosynthesis-2019 (ICARP2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Adachi
2 . 発表標題 Complementarity of SR and XFEL sources for tracking chemical reactions in solution with ultrashort X-ray pulses
3 . 学会等名 Time-Resolved Chemistry and the APS Upgrade (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Nozawa, R. Fukaya, K. Ichianagi, T. Sato, and S. Adachi
2 . 発表標題 Ultrafast structural study in photoreaction of dicyanoaurate oligomers with an X-ray free electron laser
3 . 学会等名 9th International Symposium On Photochromism (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Nozawa
2 . 発表標題 Visualizing Ultrafast Photochemical Reactions by Time-Resolved X-ray Studies
3 . 学会等名 錯体化学会第 6 9 回討論会 (招待講演)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Adachi
2 . 発表標題 Complementarity of SR and XFEL sources for tracking chemical reactions in solution with ultrashort X-ray pulses
3 . 学会等名 International Young Researchers Workshop on Synchrotron Radiation Science 2019 (YRSR2019) (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Nozawa, R. Fukaya, K. Ichiyangi, T. Sato, and S. Adachi
2. 発表標題 Visualizing a photoexcited transient structure by ultrafast x-ray studies
3. 学会等名 The 23rd International Symposium on the Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds(ISPPCC2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Adachi
2. 発表標題 Capturing structural dynamics of photocatalyst by ultrafast X-ray spectroscopy
3. 学会等名 The 5th International Conference on Ultrafast Structural Dynamics (ICUSD) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Adachi
2. 発表標題 Tracking Chemical Reactions in Solution with Ultrashort X-ray Pulses
3. 学会等名 The 1st Workshop of Reaction Infography (R-ing) Unit (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Nozawa, K. Ichiyangi, R. Fukaya, T. Sato, S. Adachi
2. 発表標題 Ultrafast Studies of Photoreaction Dynamics in Artificial Photosynthesis Systems by Laser Pump X-Ray Probe Experiments
3. 学会等名 Conference on Laser and Synchrotron Radiation Combination Experiment 2018 (LSC2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Adachi
2. 発表標題 Visualizing chemical reactions in solution with femtosecond X-ray scattering
3. 学会等名 Conference on Laser and Synchrotron Radiation Combination Experiment(LSC2018), Optica and Photonics International Congress (OPIC) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Nozawa, K. Ichianagi, R. Fukaya, T. Sato, S. Adachi
2. 発表標題 Ultrafast studies of photoreaction dynamics in artificial photosynthesis systems by time-resolved XAFS
3. 学会等名 The International Conference on X-Ray Absorption Fine Structures XAFS 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Adachi
2. 発表標題 Sub-MHz hard X-ray pump-probe (XPP) experiment at KEK PF-AR
3. 学会等名 ACS Fall Meeting (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Adachi
2. 発表標題 Visualizing Chemical Reactions in Solution with Ultrashort X-ray Pulses
3. 学会等名 pi-Figuration Japan-Spain Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 野澤俊介
2. 発表標題 電荷移動反応に伴う構造歪みの可視化
3. 学会等名 日本放射光学会第9回若手研究会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 野澤俊介
2. 発表標題 量子ビームを用いた動的構造解析と人工光合成系への応用
3. 学会等名 新学術領域研究「革新的光物質変換」第1回公開シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 野澤俊介
2. 発表標題 光反応過程における量子ビームを用いた動的構造解析
3. 学会等名 "第3回 元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型> / 大型研究施設連携シンポジウム"
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 野澤俊介
2. 発表標題 量子ビームを用いた天然・人工光合成系における動的構造解析
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 入交美奈, 竹田浩之, 小池和英, 野澤俊介, 足立伸一, 石谷 治
2. 発表標題 Fe(II)イオン、芳香族ジイミン、Cu(I)錯体光増感剤を用いた CO ₂ 還元光触媒反応とその機構
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山下晃一
2. 発表標題 光エネルギー変換材料の計算科学
3. 学会等名 スーパーコンピュータワークショップ(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山下晃一
2. 発表標題 計算科学を駆使した水分解光触媒の 機能解析と材料探索
3. 学会等名 第36回エレクトロセラミックスセミナー(招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山下晃一
2. 発表標題 計算科学を駆使した水分解光触媒の 機能解析と材料探索
3. 学会等名 電子セラミック・プロセス研究会(招待講演)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 日本化学会、福本 恵紀、野澤 俊介、足立 伸一	4. 発行年 2019年
2. 出版社 共立出版	5. 総ページ数 126
3. 書名 X線分光	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>[プレスリリース]原子が振動しながら共有結合が形成されていく様子を直接観測 https://www.kek.jp/ja/newsroom/2020/06/25/1005/</p>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	山下 晃一 (Yamashita Koichi) (40175659)	京都大学・実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット・特任教授 (14301)	

7. 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

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
韓国	KAIST	Pusan National University	YONSEI University	
ドイツ	European XFEL GmbH	University of Hamburg	Deutsches Elektronen-Synchrotron	
ハンガリー	ELI -ALPS			

共同研究相手国	相手方研究機関			
スイス	Paul Scherrer Institut			
デンマーク	University of Copenhagen	Technical University of Denmark		