

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 1 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(A)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20H00333

研究課題名（和文）キラル認識プロセスの分子論的考察－分子構造と光学非対称性から－

研究課題名（英文）Molecular-level Analysis of the Chiral Recognition Process: From Molecular Structure and its Optical Asymmetry

研究代表者

桑原 裕司 (Kawahara, Yuji)

大阪大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：00283721

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 34,400,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、キラル認識のメカニズムを、単一分子レベル解析を通して考察・解明することを目指した。6種類のヘリセン誘導体について、表面配列構造・吸着モデル構築・分子配向の同定を行い、分子キラル認識における合理的な解釈を行った。分子動力学計算、第一原理計算による基板上での分子配向、分子間相互作用、周期配列構造の予測を行い、実験との良い一致をみた。すべてのキラル誘導体分子のTERS測定を行い、理論計算との比較を行った。以上、さまざまなヘリセン誘導体の表面周期構造から解析したキラル認識状態の解析、官能基に強く依存した特異な表面周期構造の評価と、そのキラル認識メカニズムの考察に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

自然界に存在する生体分子はすべてキラルである。さらに、生体内では、これらキラル分子を生成し、さらにはそれらの環境を制御することで、ホモキラリティ環境下でキラル認識を繰り返しながら、さまざまな組織を形成・消滅させる。一方で、このキラル認識メカニズムに狂いが生じると（例えば別の光学異性体が生体内に混入すると）、生体は時に過敏な反応を示す。市販の薬品の合成については、不斉合成と、ラセミ体合成後の光学分割による分離が一般的であるが、これらキラル認識を分子レベルで観測、および制御することは、分子構造科学の基本的研究課題のみならず、生体機能制御、各種製薬作用の分子論的理解に不可欠な研究領域である。

研究成果の概要（英文）：We aimed to investigate the mechanism of chiral recognition through single-molecule level analysis. For six types of helicene derivatives, we performed surface arrangement structure analysis, adsorption model construction, and molecular orientation identification, providing a rational interpretation of molecular chiral recognition. We predicted molecular orientation on substrates, intermolecular interactions, and periodic arrangement structures using molecular dynamics calculations and first-principles calculations, which showed good agreement with the experimental results. TERS measurements were conducted for all chiral derivative molecules, and comparisons were made with theoretical calculations. Consequently, we successfully analyzed the chiral recognition states from the surface periodic structures of various helicene derivatives, evaluated the unique surface periodic structures strongly dependent on functional groups, and considered their chiral recognition mechanisms.

研究分野：表面物理化学

キーワード：キラル分子認識 走査トンネル顕微鏡 探針増強ラマン分光

## 1. 研究開始当初の背景

自然は対掌を好む。地球上での生体分子活性において、アミノ酸や糖などすべての生体分子は片方の対掌性を持つ分子、すなわち、すべての生体材料はキラルであり、一方の光学異性体（エナンチオマー）のみ生体は許容する。このような「ホモキラリティ」が、いつの段階で生じたかは生物の進化上の未解決課題の一つである。これらキラル認識プロセスの考察・解明は、生体機能の制御、不斉合成を基本とする適切な製薬プロセスの開発に関して、重要な情報を提供する。現在、分子の「構造対掌性（キラリティ）」と「光学活性」は同一の意味で使用されている。これまでに旋光計測や円偏光二色性計測など、マクロスケールの光学活性計測・評価はなされてきたが、単一分子レベルでの光学活性評価、および分子スケールでのキラル認識のメカニズムについては未踏な領域である。これらキラル認識を分子レベルで観測、および制御することは、分子構造科学の基本的研究課題のみならず、生体機能制御、各種製薬作用の分子論的理解に不可欠な研究領域である。

代表的なキラル分子系の人口合成分子ヘリセンは、芳香環が 6 個以上オルト位で縮環した有機分子であり、その立体障害により、分子はらせん状にねじれる。さらにそのねじれが右巻きか（**p**（プラス）型）、左巻きか（**m**（マイナス）型）で明瞭に区別される光学異性体が存在する。このようにヘリセン分子は典型的なキラル分子系であり、その機能や物性、キラル認識プロセスを明らかにする基礎的研究の恰好な材料である。ヘリセン分子は極めて安定な化合物であるが、光学活性ヘリセンの有効な合成法が知られていないためヘリセン分子を用いた不斉反応や分子認識の研究はいまだ未踏の領域でもある。応用分野においては、円偏向有機発光素子（OLED）の材料、さらには、生態系への適応・薬剤への応用にも注目されている。例えば 1 nm ほどの直径を持つ DNA のある部位（テロメア部位）との相互作用を制御して、抗がん剤開発を目指す研究等、今後の応用範囲も大いに期待されている。

研究代表者は、これまでに SPM 技術において日本が世界をリードする多探針 STM (J. Phys. Chem. (2004)他)、STM 発光分光法 (Chem. Phys. Lett. (2007)) を次々に構築しており、局所化学反応による単分子鎖作製とその評価 (Phys. Rev. Lett. (2003)) など、有機材料を用いたナノサイエンスの中心に位置している。さらに、超高真空円偏光極低温フォトン STM (STM-CLE) (発光強度分布測定)、超高真空極低温円偏光フォトン STM (STM-CLE) (発光スペクトル測定)、超高真空探針誘起円偏光ラマン分光 (OA-TERS) 等の複合解析装置を構築し、キラル分子系に関して、その一分子科学を展開してきた。特に OA-TERS については、CNT における右巻き・左巻きの光学非対称性を明確にしており、これらの結果は偏光分離したラマン散乱分光による振動スペクトルを単一分子レベル・局所領域（空間分解能数 nm）で成功した世界初の成果である。申請代表者は、本研究を、有機キラル分子系に適応し、特に分子レベルでのキラル認識システムを多角的に分析できるのではないかと発想に至った。本研究では、キラル分子認識プロセスおよびそのメカニズムの本質を理解するためには、キラル誘導体合成の精密制御とその分子配列構造の特定、さらには分子特定の指紋である振動スペクトルの光学活性を単一分子レベルで評価することが不可欠であるという認識に立っている。

## 2. 研究の目的

本研究では、キラル認識のメカニズムを、その分子配向・電子状態、および光学非対称性の単一分子レベル解析を通して考察・解明することを目指す。キラル分子として、安定性、構造の単純性に優れたヘリセン誘導体を研究対象とし、各種ヘリセン誘導体の合成およびキラル分離、固体表面上での低次元自己組織化構造の制御を行ったのち、STM/STS、申請者らが開発した OA-TERS を中心としたナノスケール複合分析システムを用いて、局所的な分子配列・配向と、ラマン振動状態解析・光学活性計測とを連動して、実空間、分子スケールでの電子状態・光学特性・振動特性を総合的に評価し、詳細な理論解析を遂行して、螺旋キラル分子のキラル認識メカニズムを科学することを目的とした。生体分子を含む材料物質のキラル選別は、これまでおもに光学活性評価により行われているが、光の回折限界により従来はマクロスケール計測に留まっていた。この問題の解決策として、本研究課題では TERS 手法に注目した。STM と組み合わせたラマン分光計測により、分子の指紋である振動スペクトルを基にした光学非対称性 (VOA) を計測する。申請者らは、これまで、極低温・超高真空中で動作する STM をベースとした TERS システムに、左右円偏光レーザーを入射可能な実験装置を新規に導入し、左右円偏光入射に対するラマン散乱強度の差すなわちラマン光学活性 (Raman optical activity; ROA) を光の回折限界を超えたナノスケールで評価することが可能としたシステム (OA-TERS) を世界で初めて導入し、それを具現化した世界的に見て稀有なグループであり、また、本申請研究へのアプローチに対して唯一無二だと確信する。

## 3. 研究の方法

研究代表者は、これまで走査トンネル顕微鏡測定の際、トンネル電流誘起による発光現象に注目し、円偏向吸収・発光現象を、単一分子レベルで評価すれば、キラル認識、キラル発現メカニズムの解明が可能ではないかという発想に基づいて、平成 24 年より、基盤研究 (S) 課題「キラル分子系の一分子科学」を遂行し、これまで以下の計測法を開発・整備してきた。

- (A) キラル分子の原子スケール実空間観察：  
 超高真空極低温 STM  
超高真空円偏光極低温フォトンSTM (STM-CLE) (発光強度分布測定)
- (B) キラル分子の電子状態解析：  
 超高真空極低温 STS (走査トンネル分光)  
超高真空極低温円偏光フォトンSTM (STM-CLE) (発光スペクトル測定)
- (C) キラル分子の振動解析：  
 超高真空極低温 IETS (非弾性トンネル分光)  
超高真空探針誘起円偏光ラマン分光 (OA-TERS)

以上の装置群、および適切な理論計算手法を屈指して以下の方法で研究を遂行した。

(1) ヘリセン誘導体の合成・エナンチオマー分離(大須賀)

ヘリセンは極めて安定な化合物だが、光学活性ヘリセンの有効な合成法が知られていないため、本研究では主に、ラセミ合成を行ったのち、キラルカラムにてエナンチオマー分離を行った。官能基の選択は、次の2つの点に考慮した。①共鳴ラマンモードの探索：官能基の種類により各誘導体の HOMO-LUMO ギャップが大きく変動する。この性質を利用して、今回使用する 532、633nm レーザーに適した分子設計考慮した。②自己組織化構造の変調：次項に示すように同一螺旋骨格を持ちながら、官能基が変わることによりその分子配列、分子配向を大きく変調させることが可能である。それぞれの誘導体に対して自己組織化構造とキラル認識の関係を調べるため、ラセミおよびエナンチオ分離したヘリセン誘導体試料を準備した。

(2) OA-TERS計測系の高度化(桑原、齋藤、服部)

TERS 実験は、レーザー光照射や、局所領域での高電磁場の影響を避けられないため、脆弱な有機分子系への適応については、いくつかの工夫が必要である。本申請研究において行った、OA-TERS 実験の高度化について以下に示す。

① シングルモード 633nm ダイオードレーザーシステムの導入

さまざまな状況下でのプラズモン増強効果を最大限に得るために、シングルモード 633nm ダイオードレーザーを準備して計測系に組み込み、532nm レーザーと共有する。ラマン散乱光の強さは入射光の振動数の4乗に比例するため、波長を長くするとラマン強度は減少する。それぞれの波長を使い分けながらラマン増強プロセスの最適解を求めた。

② ラマン分光光学系の一部変更

光学系は、東京インストルメント社「Nano Finder」を使用しているが、レーザースポットを探針直下に迅速にかつ正確に導くために、一部光学系を変更した。これまでの試用経験から、反射レンズの組み合わせを変更し、レーザースポット観察のための CCD カメラ位置の最適化を行うシステムを新たに導入し、これにより、光学軌道のアライメントが迅速化され、脆弱な有機分子系の TERS 測定迅速性・再現性の向上が可能となった。

(3) ヘリセン自己組織化構造の光学活性評価(桑原、服部)

① STMによるヘリセン誘導体の分子配列観察

合成したヘリセン誘導体を真空中で Ag あるいは Au 基板上に蒸着して、STM 観察を行った。特に、各ヘリセン誘導体に依存した特異な自己組織化構造を用いることで、キラル認識プロセスを単一分子レベルで考察する。本研究では、各ヘリセン誘導体について、ラセミ体、キラル分離した p-、m-体それぞれについて、分子配向・結合状態を観察した。また、STS 計測による局所電子密度を計測し、官能基に依存した周期構造変調を、大須賀にフィードバックすることで、新たなキラル認識構造のための分子合成についても検討した。

② OA-TERS 実験

作製した、分子の規則構造に対して、TERS 実験、および、OA-TERS 実験を行う。OA-TERS スペクトルにおける光学非対称性  $\Delta$  は、 $\Delta = (I_R - I_L) / (I_R + I_L)$  で表せる。 $I_R$ 、 $I_L$  はそれぞれ左右円偏光に応答するラマン散乱強度である。本パラメータを OA-TERS 実験により検出する。前述のように、申請者らが開発した STM-TERS 分光法のスペクトル空間分解能が 1nm 程度と世界最高レベルにあり、局所領域での光学非対称性が評価可能である。

(4) OA-TERSスペクトルの理論解析を目的とした計算プログラムの整備(森川)

ラマン振動分光における光学非対称性  $\Delta$  は、 $\Delta = (I_R - I_L) / (I_R + I_L) = D_{eg} \cdot R_{eg} / D_{eg} = -g_{ecd} / 2$  で表せる。 $D_{eg}$  および  $R_{eg}$  は分子の電子双極子能、“回転強度”であり、この  $R_{eg}$  (rotational strength) が光学活性のもととなる電気四重極子を形成する。実験および理論計算比較による EOV の解析を遂行し、理論計算の VOA への展開とそれに伴う EOV との定量的な比較も試みた。

#### 4. 研究成果

本研究の成果として、以下に評価の高い国際ジャーナルに掲載された論文を抜粋した。研究成果として、各論文の骨子となる研究成果の内容をそれぞれの論文ごとにまとめた。

(本研究に関連する学術雑誌発表リスト)

1. S. Kimura, T. Hattori, C. Ye, M. Okada, S. Kondo, Y. Sakurama, A. Saito, P. Krukowski, H. Osuga and Y. Kuwahara, “STM/TERS observation of (M)-type diphenyl[7]thiaheterohelicene on Ag(111)”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26**(43), 7658-7663 (2024).

2. C. Ye, T. Hattori, Y. Hamamoto, P. Krukowski, K. Inagaki, A. Saito, H. Osuga, Y. Morikawa, and Y. Kuwahara, “Chiral Recognition Mechanism of Two-Dimensional Self-Assembly Formed by [7]Thiaheterohelicene”, *J. Phys. Chem. C* **127**(43), 21305–21312 (2023).
3. P. Krukowski, T. Hattori, M. Akai-Kasaya, A. Saito, H. Osuga and Y. Kuwahara “Light Emission from M-Type Enantiomer of 2,13-bis(hydroxymethyl)[7]-thiaheterohelicene Molecules Adsorbed on Au(111) and C60/Au(111) Surfaces Investigated by STM-LE” *Int. J. Mol. Sci.*, **23**(23), 15399 (2022).
4. I. Lutsyk, P. Krukowski, T. Hattori, Y. Kuwahara, P. J. Kowalczyk, et al., “Influence of structural defects on charge density waves in 1T-TaS<sub>2</sub>”, *Nano Research* **16**, 11528–11539 (2023).
5. P. Krukowski, T. Hattori, M. Okada, M. Piskorski, I. Lutsyk, A. Saito, H. Osuga, and Y. Kuwahara, “Study of stereochemical crystallization of racemic mixtures of [5] and [7]thiaheterohelicene molecules on Ag(111) surface by scanning tunneling microscopy and Raman scattering spectroscopy”, *Appl. Surf. Sci.* **589**, 152860 (2022).
6. P. Krukowski, S. Chaunchaiyakul, M. Akai-Kasaya, A. Saito, H. Osuga, and Y. Kuwahara, “Adsorption and Light Emission of a Racemic Mixture of [7]thiaheterohelicene-2,13-carboxaldehyde on Au(111), Cu(001), and NiAl(110) Surfaces Investigated Using a Scanning Tunneling Microscope”, *J. Phys. Chem. C* **125**, 9419–9427 (2021).

### 論文 1

エナンチオピュアな(M)型 2,13-ジフェニル[7]チアヘテロヘリセンの表面周期構造におけるキラル認識を STM および TERS によって評価した。これまでのチアヘテロヘリセンおよびその誘導体は、Ag(111)基板上でジグザグ鎖を形成したが、本分子はそれとは対照的に、六角形の秩序構造が観察されました。得られた分子の TERS スペクトルは、DFT 計算に基づいて計算されたラマンスペクトルと一致しており、分子が分解せずに基板に吸着していたことを示唆している。STM の試料電圧依存性と理論計算を比較したところ、フェニル環が+3.0 V で輝点として観察されるのに対し、ヘリセン骨格は+0.5 V で観察されることが分かった。これらの結果から、六角形構造の可能なモデルを提案 (図 1) し、本分子のキラル分子認識が主に分子間および分子/基板間のファンデルワールス相互作用のバランスにより形成されていることを示した。

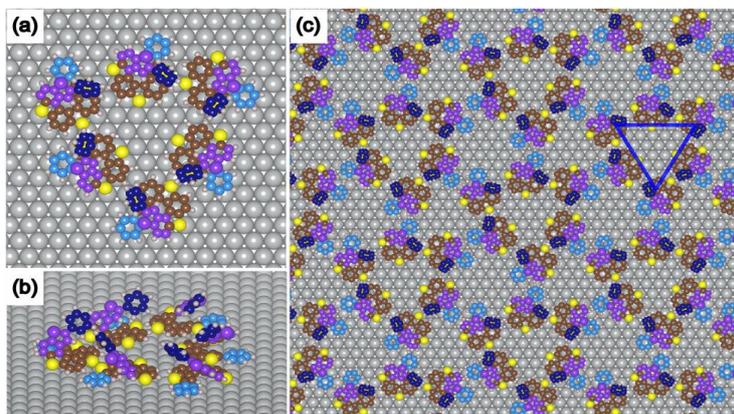


図 1 ジフェニル[7]ヘリセンの表面吸着モデル

### 論文 2

Ag(111)表面におけるラセミ[7]チオヘテロヘリセン ([7]TH) の秩序構造の形成メカニズムについて、少数の分子を用いた理論研究を用いて解析した。DFT 計算は、[7]TH が Ag(111)表面に物理吸着し、有意な S-Ag 化学結合を形成していないことを示唆しており、これは XPS とよく一致した。表面の動的な解析である MD シミュレーションをグラフェン基板上で行い、Ag(111)表面で STM 実験によって観察されたジグザグ鎖構造をうまく再現することを示した (図 2)。この構造では、 $\pi$ - $\pi$  相互作用を介して結合したラセミキラル二量体が鎖構造の重要な構成要素であることが分かった。隣接するジグザグ鎖の分子配置を 4 個のラセミ[7]TH 分子を用いて評価し、周期配列構造中で 2 つのエネルギー的に等価な配置があることが

示唆された。STM 観察と比較すると、計算ではグラフェン上では隣接するジグザグ鎖間の距離が小さくなることから、実験で得られた周期構造は、Ag(111)表面と吸着分子の相互作用が [7]TH の 2 次元長距離秩序に微妙に影響を与えていることが分かった。以上の結果は、MD シミュレーションが、STM などの実験手法では実証が難しい、キラル分子認識の初期のプロセスの解明に対して非常に有効であることを示している。本論文で示したキラル分子の分子認識・集合体形成の動的プロセス解析のアプローチは、ヘリセンのような人工キラル分子のみならず、他の類似キラルシステム、特に生体中でのキラル認識メカニズムの検証についても有望となる。

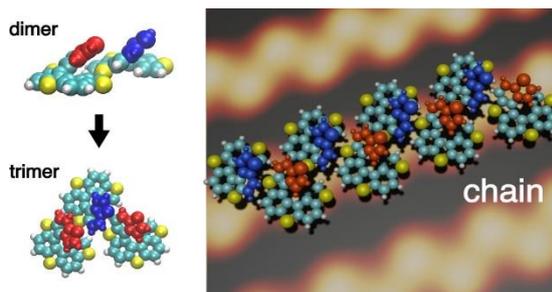


図 2 [7]TH の表面吸着モデル

### 論文 3

M型エナンチオマーの [7]チアヘテロヘリセン ((M)-[7]TH-ジオール) のトンネル電流誘起発光スペクトルを計測し、清浄 Au(111)表面および C<sub>60</sub> で覆われた Au(111)表面上に吸着した分子発光の比較を行った。清浄表面上では強いプラズモン由来の発光が観察されたが、分子が Au(111)のエッジに吸着した領域では発光強度が著しく抑制された。励起ヘリセン分子から STM 発光の消光と、Au(111)表面からの強いプラズモン発光を抑制するため、C<sub>60</sub> 層を Au(111)表面の間のバッファ層として使用したところ、ヘリセン分子は C<sub>60</sub> バッファ層よりも Au(111)表面に優先的に吸着した。そのため C<sub>60</sub> 分子の吸着量を増やし、C<sub>60</sub> 層に多層のヘリセン分子多層を堆積したところ、ヘリセン/C<sub>60</sub> 多層膜からは、ヘリセン分子特有の分子発光を含んだ強い STM 発光が観測された。このようなヘリセン分子多層膜からの強い光放出は、(M)-[7]TH-ジオール分子の電子状態によって強く変調された探針誘起プラズモン発光であると同定した。

### 論文 4

ポーランド Lodz 大学との共同研究に関する論文を発表した。遷移金属ダイカルコゲナイド (TMDCs) の一種である 1T-TaS<sub>2</sub> の表面電荷密度波が、剥離表面やキャップ層との境界でどのような構造変化・電子状態変化を生み出すかを、STM、光電子分光、理論計算など、様々な評価手法を駆使して解析した。研究代表者のグループでは、特に STM を用いた高分解能実空間像の取得に成功し、特に、表面原子欠陥が表面電荷密度波にどのような影響を与えるかという本論文の中心のテーマの解析に貢献した。本研究をもとに、Lodz 大学および大阪大学の研究代表者のグループとの研究・人材交流、共同研究が大きく前進した。

### 論文 5

Ag(111)表面上で、ラセミ [5]及び [7]チアヘテロヘリセン分子の 2 次元周期構造について、芳香環の数の違いによる立体特異的相互作用の影響を STM-TERS を用いて評価した。[5]チアヘテロヘリセン分子は、表面被覆率の変化により、周期構造が大きく変調したが、すべての周期構造において、エナンチオマー種の絶対的な向きを明確に行うことに成功した。対照的に、[7]チアヘテロヘリセン分子間の立体化学キラル相互作用の影響で、STM では単一の周期構造を示し、それに基づいて最も適切な構造モデルを提案した。X 線光電子分光の解析から、両チアヘテロヘリセン分子は、Ag(111)表面に物理吸着し、S-Ag 化学結合が形成されていないことを示した。表面増強ラマン分光法と密度汎関数理論に基づく理論計算を組み合わせることで、吸着した分子の化学的分析に成功した (図 3)。

### 論文 6

ラセミ混合物の [7]チアヘテロヘリセン-2,13-カルボキシアルデヒド ([7]-TH アルデヒド) の Au(111)、Cu(001)、および NiAl(110)表面への吸着過程、および表面分子配向の被覆率依存性を、STM と STM 発光分析を用いて評価した。低被覆率では、Au(111)上の [7]-TH アルデヒドの吸着プロセスは Au(111)表面の再配列構造の影響を強く受けることが分かった。単分子層形成後は、Au(111)上(112)方向に配列した特徴的な自己組織化構造が観察された。この構造について、(M)-および(P)-エナンチオマーが交互に配列したジグザグパターンであること同定した。

(図 4) Au(111)上に吸着した [7]-TH アルデヒドの STM 発光分析測定では、分子発光強度の減少が顕著であった。Cu(001)および NiAl(110)上の分子吸着では、Au(111)上と異なり、周期構造の形成は見られず、分子クラスターが観察された。Au(111)上および Cu(001)上に吸着したヘリセン分子の STM-LE では、分子上でのプラズモン光放出が大きく抑制された。一方 Au(111)および Cu(001)基板とは対照的に、NiAl(110)上に形成された分子クラスター上での発光増強が観測され、分子由来のプラズモン増強発光を分子振動励起の観点から解析した。

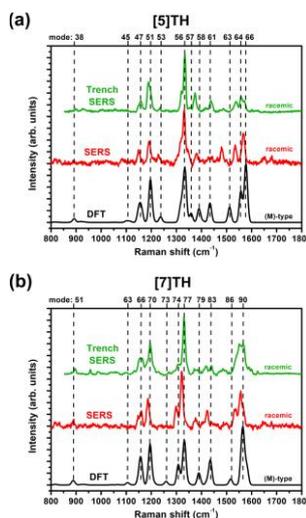


図 3 (a)[5]TH および (b)[7]TH のラマンスペクトル

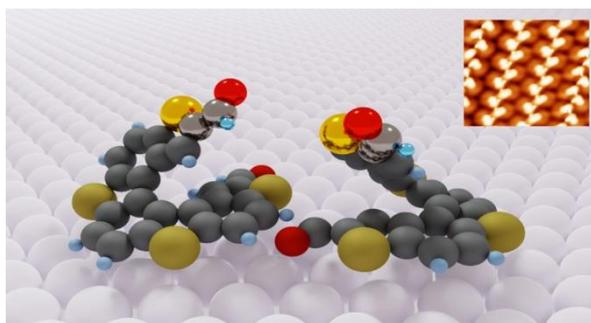


図 4 [7]-TH アルデヒドの STM 像 (挿入図) と表面吸着モデル

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 6件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Pawel Krukowski, Takuma Hattori, Megumi Akai-Kasaya, Akira Saito, Hideji Osuga and Yuji Kuwahara	4. 巻 23(23)
2. 論文標題 Light Emission from M-Type Enantiomer of 2,13-bis(hydroxymethyl)[7]-thiaheterohelicene Molecules Adsorbed on Au(111) and C60/Au(111) Surfaces Investigated by STM-LE	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 International journal of molecular science	6. 最初と最後の頁 15399 (10 page)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/ijms232315399	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 Pawel Krukowski, Takuma Hattori, Masaki Okada, Michal Piskorski, Iaroslav Lutsyk, Akira Saito, Hideji Osuga, and Yuji Kuwahara	4. 巻 589
2. 論文標題 Study of stereochemical crystallization of racemic mixtures of [5] and [7]thiaheterohelicene molecules on Ag(111) surface by scanning tunneling microscopy and Raman scattering spectroscopy	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Applied Surface Science	6. 最初と最後の頁 152860
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsusc.2022.152860	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 Pawel Krukowski, Songpol Chaunchaiyakul, Megumi Akai-Kasaya, Akira Saito, Hideji Osuga, and Yuji Kuwahara	4. 巻 125
2. 論文標題 Adsorption and Light Emission of a Racemic Mixture of [7]thiaheterohelicene-2,13-carboxaldehyde on Au(111), Cu(001), and NiAl(110) Surfaces Investigated Using a Scanning Tunneling Microscope	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 9419,9427
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c0109110	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 服部卓磨	4. 巻 Vol.73 (3)
2. 論文標題 ヘリセン分子膜の成長過程と電子状態のナノスケール観察	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 生産と技術	6. 最初と最後の頁 58
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 Sho Kimura, Takuma Hattori, Changqing Ye, Masaki Okada, Satoshi Kondo, Yui Sakurama, Akira Saito, Pawel Krukowski, Hideji Osuga and Yuji Kuwahara	4. 巻 26(43)
2. 論文標題 STM/TERS observation of (M)-type diphenyl[7]thiaheterohelicene on Ag(111)	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 7658-7663
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3CP05813A	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 I. Lutsyk, P. Krukowski, T. Hattori, Y. Kuwahara, P. J. Kowalczyk, et al.	4. 巻 16
2. 論文標題 I. Lutsyk, P. Krukowski, T. Hattori, Y. Kuwahara, P. J. Kowalczyk, et al., "Influence of structural defects on charge density waves in 1T-TaS2	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nano Research	6. 最初と最後の頁 11528-11539
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1077/s12274-023-5876-7	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 Changqing Ye, Takuma Hattori, Yuji Hamamoto, Pawel Krukowski, Kouji Inagaki, Akira Saito, Hideji Osuga, Yoshitada Morikawa, and Yuji Kuwahara	4. 巻 127(43)
2. 論文標題 Chiral Recognition Mechanism of Two-Dimensional Self-Assembly Formed by [7]Thiaheterohelicene	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 21305-21312
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.3c04406	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17件(うち招待講演 4件/うち国際学会 7件)

1. 発表者名 Takuma Hattori Pawel Krukowski Ye Changqing, Yuji Hamamoto, Akira Saito, Yoshitada Morikawa, Hideji Osuga, Yuji Kuwahara
2. 発表標題 Chiral recognition of thiaheterohelicene molecules studied by STM and TERS
3. 学会等名 International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2022(ICCMSE2022)(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 服部卓磨, 木村翔, 湯原拓海, 斎藤彰, 大須賀秀次, 桑原裕司
2. 発表標題 STM-TERSによるヘリセンジフェニル分子のキラリティーと振動スペクトルの評価
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Changqing Ye, Takuma Hattori, Yuji Hamamoto, Pawel Krukowski, Akira Saito, Hideji Osuga, Yoshitada Morikawa, Yuji Kuwahara
2. 発表標題 Theoretical study on the chiral recognition mechanism of thiaheterohelicene molecules using DFT and MD calculations
3. 学会等名 2022年度関西薄膜・表面物理セミナー
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Changqing Ye, Takuma Hattori, Yuji Hamamoto, Pawel Krukowski, Akira Saito, Hideji Osuga, Yoshitada Morikawa, Yuji Kuwahara
2. 発表標題 Molecular dynamics study on chiral recognition mechanism of thiaheterohelicene molecules
3. 学会等名 2023年日本物理学会春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 服部卓磨, 鈴木凌, 斎藤彰, 大須賀秀次, 桑原裕司
2. 発表標題 キラルPTCDI分子の円偏光発光特性の評価
3. 学会等名 2023年日本物理学会春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuji Kuwahara
2. 発表標題 Stereochemical Recognition of Racemic Mixtures of [5] and [7]thiaheterohelicene Molecules on Metal Surfaces using Scanning Tunneling Microscope and Raman Scattering Spectroscopy
3. 学会等名 17th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuji Kuwahara
2. 発表標題 Stereochemical Recognition of Racemic Mixtures of [5] and [7]thiaheterohelicene Molecules on Metal Surfaces using Scanning Tunneling Microscope and Raman Scattering Spectroscopy
3. 学会等名 The 5th international symposium on "Elucidation of Next Generation Functional Materials/Surface and Interface Properties (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 岡田将希, 服部卓磨, Pawel Krukowski, 大須賀秀次, 齋藤彰, 桑原裕司
2. 発表標題 STM-TERSを用いたヘリセンディフェニルのキラル認識機構の評価
3. 学会等名 第82回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 服部卓磨, 岡田将希, 鈴木凌, 大須賀秀次, 齋藤彰, 桑原裕司
2. 発表標題 STM-TERSによるヘリセン誘導体の局所構造観察
3. 学会等名 2021年度日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 服部卓磨, 岡田将希, 大須賀 秀次, 齋藤 彰, 桑原 裕司
2. 発表標題 STMによるヘリセン誘導体のキラリティーの評価
3. 学会等名 2021年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 C. Ye, T. Hattori, Y. Hamamoto, P. Krukowski, A. Saito, H. Osuga, Y. Morikawa, and Y. Kuwahara
2. 発表標題 Theoretical study on stereo recognition of thiaheterohelicene on Ag(111)
3. 学会等名 36th European Conference on Surface Science (ECOSS36) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 T. Hattori, R. Suzuki, A. Saito, H. Osuga, and Y. Kuwahara,
2. 発表標題 Optical properties of chiral PTCDI molecules investigated by STM-induced luminescence
3. 学会等名 36th European Conference on Surface Science (ECOSS36) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Y. Kuwahara, T. Hattori, P. Krukowski, C. Ye, A. Saito, Y. Hamamoto, Y. Morikawa, and H. Osuga
2. 発表標題 Stereochemical Recognition of thiaheterohelicene derivatives Investigated by STM and Raman Scattering Spectroscopy
3. 学会等名 36th European Conference on Surface Science (ECOSS36) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Changqing Ye, Takuma Hattori, Yuji Hamamoto, Pawel Krukowski, Akira Saito, Hideji Osuga, Yoshitada Morikawa, Yuji Kuwahara
2. 発表標題 Dependence of functional groups on chiral recognition of thiaheterohelicene derivatives
3. 学会等名 2024年日本物理学会春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 木村翔, 服部卓磨, 仲西秀就, Pawel Krukowski, 大須賀秀次, 齋藤彰, 桑原裕司
2. 発表標題 STM-TERSを用いたジフェニルヘリセンのキララル認識機構の評価
3. 学会等名 第84回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 服部卓磨, 春名泰成, 齋藤彰, 大須賀秀次, 桑原裕司
2. 発表標題 STM誘起発光を用いたキララルPTCDI分子の吸着構造と円偏光発光の解析
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Y. Kuwahara, T. Hattori, P. Krukowski, C Ye, A. Saito, and H. Osuga
2. 発表標題 Stereo chemical recognition of thiaheterohelicene derivatives observed by STM and Raman scattering spectroscopy
3. 学会等名 ICNAAM 2024 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

桑原研究室 Kuwahara Lab.  
<http://www-ss.prec.eng.osaka-u.ac.jp/>

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	服部 卓磨  (Hattori Takuma)  (10876965)	大阪大学・大学院工学研究科・助教   (14401)	
研究分担者	大須賀 秀次  (Osuga Hideji)  (50304184)	和歌山大学・システム工学部・准教授   (14701)	
研究分担者	森川 良忠  (Morikawa Yoshitada)  (80358184)	大阪大学・大学院工学研究科・教授   (14401)	
研究分担者	齋藤 彰  (Saito Akira)  (90294024)	大阪大学・大学院工学研究科・准教授   (14401)	

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			
ポーランド	Lodz University			