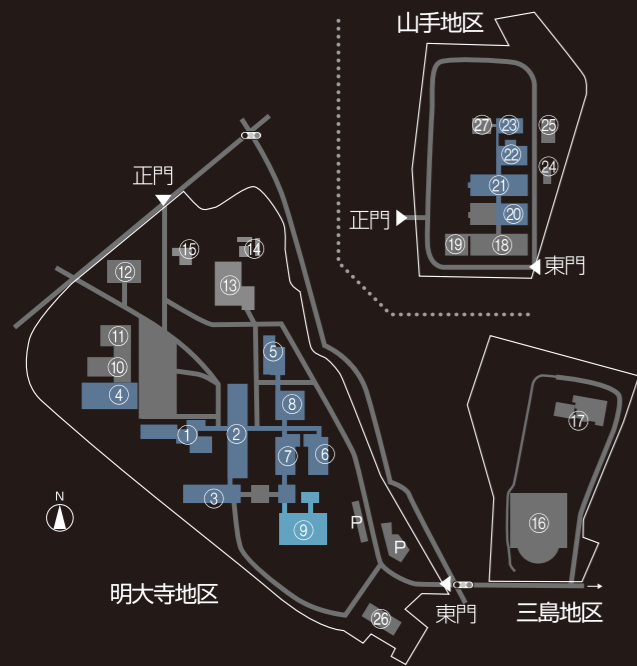


大学共同利用機関法人 自然科学研究機構

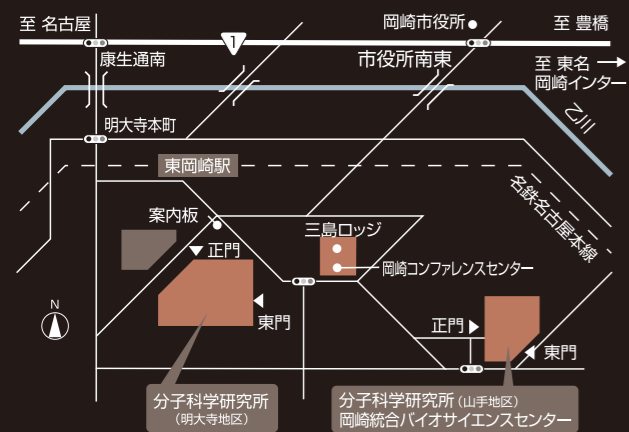
分子科学研究所

所内案内



施設	面積 m ²
① 研究棟	2,752
② 実験棟	8,857
③ 南実験棟	3,935
④ 計算科学研究センター棟	2,474
⑤ 極低温棟	1,527
⑥ 化学試料棟	1,063
⑦ レーザーセンサー棟	1,053
⑧ 装置開発棟	1,260
⑨ 極端紫外光実験棟	3,097
⑩ 事務センター棟	2,371
⑪ 図書館	2,002
⑫ 職員会館	1,575
⑬ エネルギーセンター	1,514
⑭ 廃棄物貯蔵庫	60
⑮ 警備員室	74
⑯ 岡崎コンファレンスセンター	2,863
⑰ 三島ロッジ	4,079
⑱ 山手1号館A	4,674
⑲ 山手1号館B	2,303
⑳ 山手2号館	8,453
㉑ 山手3号館	10,757
㉒ 山手4号館	3,813
㉓ 山手5号館	664
㉔ 実験排水処理施設	111
㉕ 高圧配電施設	440
㉖ 明大寺ロッジ	1,023
㉗ IBBPセンター棟	492

アクセス



■ 東京方面から

豊橋駅下車、名鉄(名古屋鉄道)に乗り換えて、東岡崎駅下車(豊橋-東岡崎間約20分)、南口より徒歩約7分。

■ 大阪方面から

名古屋駅下車、名鉄に乗り換え、東岡崎駅下車(名鉄名古屋-東岡崎間約30分)、南口より徒歩約7分。



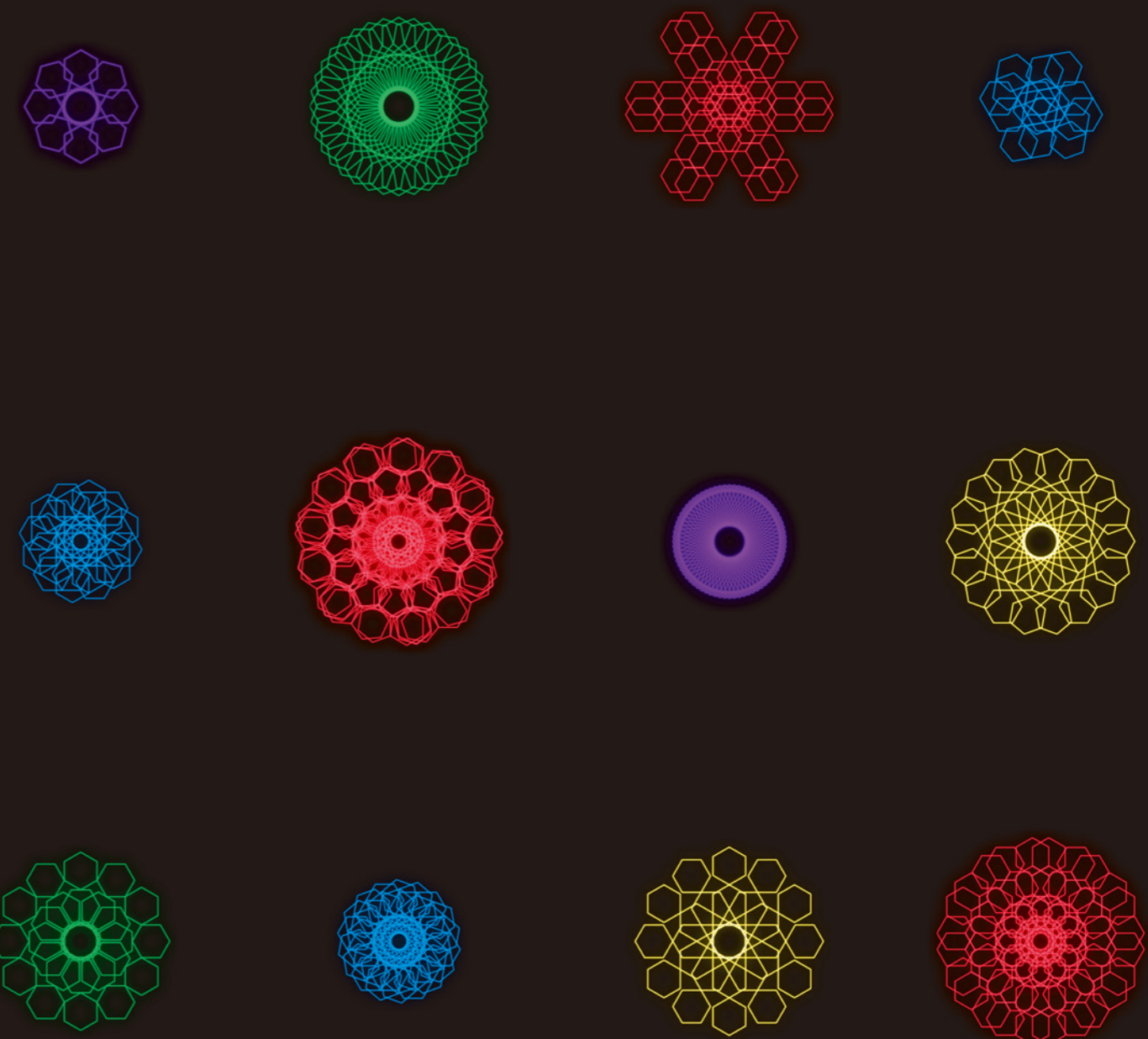
■ 中部国際空港から

名鉄空港線:中部国際空港駅から「特急」豊橋・東岡崎方面に乗り東岡崎下車(中部国際空港-東岡崎間約60分)、南口より徒歩約7分。

名鉄空港バス:JR岡崎駅に乗り、東岡崎駅下車(中部国際空港-東岡崎間約65分)、南口より徒歩約7分。

■ 自動車利用の場合

東名高速道路の岡崎ICを下りて国道1号線を名古屋方面に1.5km、市役所南東信号を左折。ICから約10分。





分子と対話し、その豊かな知恵を活かす

分子科学は、分子と対話し、分子がつくりだす多様な自然の現象の源を探り、またその知識を基に新しい物質機能を創出しようとする学問であり、その対象は個々の分子から生命・宇宙現象の非常に広い範囲にわたります。分子科学研究所は、そのような分子科学の研究の中核拠点として実験的研究および理論的研究を行うとともに、広く研究者の共同利用に供することを目的として設立された大学共同利用機関です。分子科学研究所は創設以来35年余、多くの画期的な研究を行い、また物理・化学研究を支える人材を輩出し、日本のみならず世界のトップインスティテュートとして、分子科学研究の振興を行ってきました。

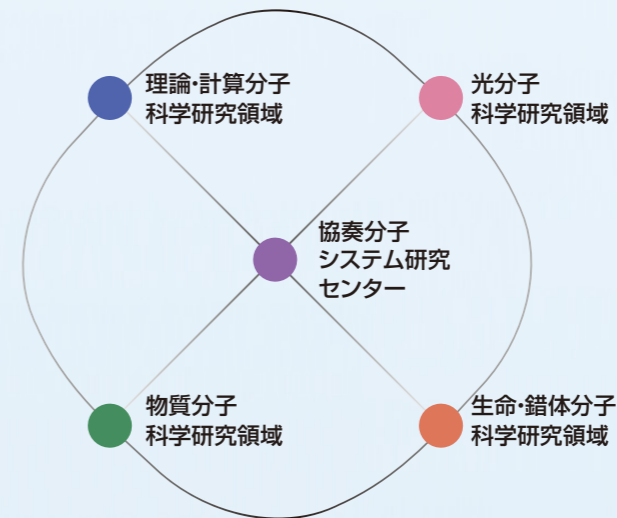
現在、分子科学研究所は理論・計算分子科学、光分子科学、物質分子科学、生命・錯体分子科学の4つの研究領域と、極端紫外光研究施設を始めとする7つの研究施設を擁し、分子の構造と反応と機能について先鋭的な基礎研究を進め、分子の新たな可能性を探っています。現在、科学研究はマイクロとマクロの領域をダイナミックに結びつけつつあります。マイクロとマクロの

中間にある、ポストナノとも呼ばれる世界は、まさに物質の機能が生じ、また生命の現象が生まれる「豊かな分子の場」です。このような「場」において、分子の集団がエネルギー・エントロピー情報のやり取りをしながら、微妙な相関を持ち、物質・生命の機能を生んでいる原理を明らかにすることは、自然を司る「分子の知恵」を学ぶことであり、まさに分子科学の新たな研究のフィールドです。そのような新しい分子科学を研究するセンターとして、「協奏分子システム研究センター」を2013年4月から発足させました (<http://cimos.ims.ac.jp>)。すなわち、自然界で多重の階層を越えて機能している分子システムの知恵に学び、「柔軟かつ堅牢で卓越した機能をもつ分子システム」を構築することを目的とした研究センターです。分子科学研究所スタッフの約半数が関わる大きな研究センターとなります。さらに分子科学が長年培ってきた分子測定・コントロール実験法を極限まで追求し分子の新しい可能性を探る研究グループとともに分子科学の新たな時代を創っていきたく希望しています。

自然科学研究機構・分子科学研究所
所長 大峯 巖

分子科学研究所とは

What is IMS?

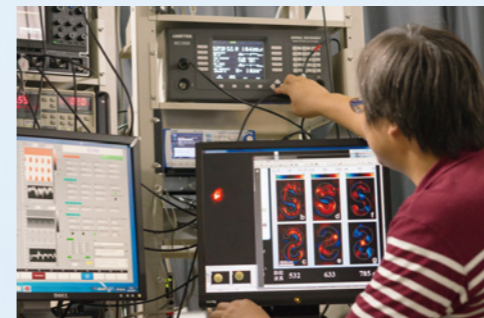


分子を調べることは、分子を構成単位とする物質や生命への理解を深めることに他なりません。分子科学研究所は、分子を軸足に置いた科学を展開する中核的研究拠点として、1975年に愛知県岡崎市に設立された大学共同利用機関です。2004年より自然科学研究機構を構成する5つの研究機関の1つとして、ミッション*達成に向けて研究所全体が一丸となって、日々研究に取り組んでいます。

*豊かな自然において多様な物質循環、エネルギー変換を司っている「分子」についての知識を深め、卓越した機能をもつ分子系を創成すること。国際的な中核共同研究センターとして、国内外の分子科学研究を先導すると同時に、生命科学・天文科学などをふくむ分子が関与する広汎な関連分野の研究者と協同して、科学の新たな研究領域を創出すること。

As an Inter-University Research Institute

大学共同利用機関として



分子科学研究所では、シンクロトロン放射光施設・スーパーコンピュータや汎用大型コンピュータ・超高磁場NMRなどの大型研究施設や、物性測定・化学分析・分光計測に関する汎用測定装置を維持・運営し、全国の大学研究者に広く利用頂いています。このように所内外で研究者が活発に交換することにより、年間600件近い共同研究・施設利用が実施されており、2,000名以上のほのぼの所の研究者が参加しています。

Fostering of Young Researchers

若手研究者の育成



分子科学研究所の全教授、全准教授、全助教は、総合研究大学院大学(総研大)の教員を担当しています。総研大2専攻(構造分子科学専攻・機能分子科学専攻)に所属する学生の皆さんは、教員のきめ細やかな指導のもとで、分子科学研究所が所有する世界トップレベルの研究設備を活用して研究を進めることができます。分子科学分野における大学院教育で大きな貢献をしています。

卓越した機能をもつ分子系を創成すること
「分子」についての知識を深め、

分子科学研究所では、理論・計算分子科学、光分子科学、物質分子科学、および、生命・錯体分子科学という4つの大きな研究領域において、教授もしくは准教授の独立した研究グループが互いにゆるやかに連携を取りながら、自由な発想に基づいて世界最先端の研究を進めています。さらに、この4研究領域での成果を統合し、新しい学際的分野を切り拓くために、協奏分子システム研究センターを設置しました。

見えない複雑な分子を描き出す
理論・計算分子科学研究領域

分子およびその集合体(気相、液相、固相)、さらには生体分子やナノ物質など複雑系や複合系に関する構造および機能を量子力学、統計力学、分子シミュレーションを中心とした理論・計算分子科学の方法により解明します。

光を造る、光で観る、光で制御する
光分子科学研究領域

分子に光をあてると様々な興味深い性質を現したり、化学反応を起こしたりします。分子科学研究所では、分子の構造や性質を光で調べ、反応や物性を光で制御する研究を行っています。そのために必要となる高度な光源の開発も行っています。

分子システムの解析と創成
協奏分子システム研究センター

分子がシステムとして組織化され、卓越した機能を発現する仕組みを研究しています。1つの分子と分子システムを結び階層構造を理解し、その原理に基づいた分子システムのデザインに取り組んでいます。

物質創成、機能制御、新しい観測手法の開発
物質分子科学研究領域

新たな現象や有用な機能の発見を目指して、新規分子の開発やそれらの高次集積化と、電気・光物性、反応性、触媒能などの研究を行っています。

生体機能の実現と無駄のない化学反応へ
生命・錯体分子科学研究領域

生物が示す多彩な生体機能の発現が、どのような機構で行われているか分子レベルで解明するための研究を行っています。中心金属と配位子の組み合わせで金属錯体は多種多彩な機能を発現します。その特色を生かしてエネルギー・環境問題軽減のための高効率エネルギー変換、水中での有機化合物の分子変換、無機小分子の活性化を行っています。

理論・計算分子
科学研究領域



齊藤 真司(教授)

1988年慶應義塾大学理工学部卒、1990年京都大学大学院工学研究科修士課程修了、1995年博士(理学)(総研大)。1990年分子科学研究所技官、1994年名古屋大学理学部助手、1998年助教授を経て2005年10月より現職。1999年基生研、2000年統合バイオサイエンスセンター、2005年東京大学客員助教授、2006年から2010年3月まで東京大学、2008年国立情報学研究所客員教授。
TEL: 0564-55-7300
mail: shinji@ims.ac.jp

〈キーワード〉

- 揺らぎ
-
- 緩和
-
- 不均一性
-
- 階層的ダイナミクス

■理論分子科学第一研究部門

時間・空間的に不均一な凝縮系ダイナミクスの分子論的起源の研究

溶液や生体などの系では、フェムト秒オーダーの分子振動から、マイクロ秒からミリ秒さらに遅い時間スケールにいたる分子集団(液体構造)やタンパク質の構造の変化が存在します。このような階層的な運動は時間スケールにおいて広範なレンジにわたっているだけでなく、それぞれの運動により空間スケールも異なっています。また、光などの外部摂動による分子の電子状態変化によっても、このような時間的にも空間的にも不均一な運動が誘起され、集団的な構造変化や化学反応にいたることもあります。さらに、このような熱的および非熱的な電子・分子ダイナミクスによる状態の変化の結果として、凝縮系は様々な物性や機能を示します。

私たちは、超高速ダイナミクスから遅い構造(状態)変化にいたる不均一で階層的な凝縮系ダイナミクスの分子論的機構を明らかにするために、統計力学や量子力学に基づく独自の理論計算・解析手法を開発し、さらに分子シミュレーションや電子状態計算を駆使した以下の研究を行っています。

溶媒の影響を考慮した電子状態計算に基づくポテンシャル面を構築し、光励起による励起状態プロトン移動に関する研究を行っています。その結果、反応に関わる運動モードの高速緩和ダイナミクスを明らかにし、溶媒の有無によるエネルギー緩和過程の違いなどを見出しています。また、近年、高次非線形分光法の実験により、振動モードの揺らぎや緩和過程が明らかになってきています。私たちは、なぜ高次非線形分光法が詳細なダイナミクスの情報を提供できるのかを明らかにし、その第一原理的計算手法の開発を世界に先駆けて行ってきました。

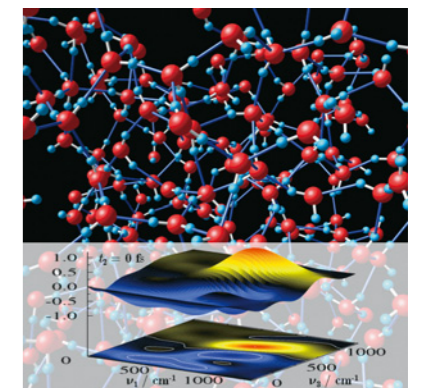
参考文献

- 1) T. Yagasaki and S. Saito, Fluctuations and Relaxation Dynamics of Liquid Water Revealed by Linear and Nonlinear Spectroscopy, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **64**, 55-75 (2013) (invited).
- 2) K. Kim and S. Saito, Multiple Length and Time Scales of Dynamic Heterogeneities in Model Glass-Forming Liquids: A Systematic Analysis of Multi-Point and Multi-Time Correlations, *J. Chem. Phys.*, Special Topic: Glass Transition, **138**, 12A506 (13 pages) (2013) (invited).
- 3) S. Saito, I. Ohmine, and B. Bagchi, Frequency Dependence of Specific Heat in Supercooled Liquid Water and Emergence of Correlated Dynamics, *J. Chem. Phys.* **138**, 094503 (7 pages) (2013).
- 4) C. Kobayashi and S. Saito, Relation between Conformational Heterogeneity and Reaction Cycle of Ras: Molecular Simulation of Ras, *Biophys. J.* **99**, 3726-3734 (2010).

さらに、水の分子内・分子間運動の三次赤外分光法に対する理論計算を行い、それらのモードにおける環境の不均一性の変化、モード間のエネルギー緩和機構を明らかにし、これらに基づき水の特徴である高速ダイナミクスの起源を明らかにしました。

このような超高速ダイナミクスに加え、単純液体には見られない過冷却液体の時間的・空間的不均一ダイナミクスの起源についても研究を行っています。高次非線形分光法の例からも分かりますように、系の不均一性を明らかにするためには多時間相関関数が不可欠となります。しかし、これまで一時間相関関数を用いた解析しか行われていませんでした。私たちは多時間相関関数を用いた解析を行い、低温になるにつれて、従来の時間スケールに比べ、もっとゆっくりと不均一性が変化していくことを明らかにしました。また、過冷却水は異常な熱力学的性質を示すことが古くから知られていますが、その分子論的起源はほとんど明らかになっていませんでした。私たちは熱力学量を動的変数に一般化し、比熱の特異的温度依存性を生み出す揺らぎの時間・空間スケールを明らかにしました。さらに、主成分分析などを用いて、通常のシミュレーションでは到達不可能な生体分子の遅い構造変化の経路の解析なども行っています。

このように、私たちは様々な運動が複雑に絡み合って生まれる凝縮系ダイナミクスに興味を持って研究を進めています。これらの研究をさらに発展させ、逐次的な状態変化(反応)がなぜ、どのように進むのかという化学の基本的問題、物性や機能の解明の礎を築き、新しい物性・機能発現の指導原理の獲得へと展開していきたいと考えています。



水のスナップショットと分子間運動に関する二次元赤外スペクトル

■理論分子科学第一研究部門
ナノ構造体電子・電磁場ダイナミクスの理論と量子デバイス科学への展開



信定 克幸(准教授)

1991年東北大学理学部卒業、
1995年東京大学大学院理学系研究科博士課程中退、博士(理学)。1995年分子科学研究所助手、1999年北海道大学理学部助手を経て2004年6月より現職。

TEL: 0564-55-7311

FAX: 0564-53-4660

mail: nobusada@ims.ac.jp

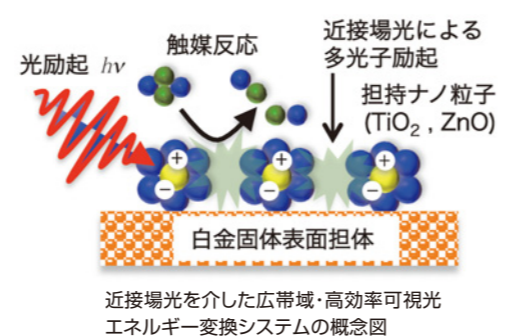
光(電磁場)と物質の相互作用は非常に多くの研究領域で極めて重要な現象であり、分子科学の根幹を成している現象であると言っても過言ではありません。身近な例では、物には色が付いており、その色が認識できること、その色が褪せていくこと、新しい物質を生み出す反応が起こること、また光合成などにも強く関係しています。更には物質の構造や性質を理解するための分光学、太陽電池や光触媒反応、フォトニック材料開発などの研究分野では光と物質の相互作用の理解を避けて通ることはできません。ところがこの相互作用の基礎理学的理解は未だ十分なものではありません。これまで物質科学の研究分野では光と物質の相互作用は、双極子近似と呼ばれるある簡便な近似を使って議論されてきました。この近似においては、光は空間的に変動のない“のっぺりした一様な”外場として扱われ、更には物質系(電子系)の運動の結果生じる新しい電磁場と電子が再帰的に相互作用する効果(自己無撞着性)も考慮に入れていません。ところが、最近のナノテクノロジーの進展は目覚ましいものがあり、数十ナノメートルオーダー以下の極めて精巧な物質が作られるようになり、またそのような物質に新たな機能を持たせる試みが盛んに行われています。このような状況下では、もはや光と物質の相互作用の非一様性や自己無撞着性が無視できなくなり、双極子近似の妥当性は脆くも崩れ去ります。それ故に双極子近似を超えた光応答理論の

開発が必要になってきます。そこで我々のグループでは、ナノ構造体と光の相互作用をより正確に扱う為の光応答理論の開発とその理論に基づく数値計算手法の開発を行い、機能性を持った次世代量子デバイスを設計するための指針を理論的・数値的に与えるべく研究を進めています。

上記したように光と物質の相互作用の理解においては、非一様性と自己無撞着性が大きな鍵となります。我々は光の空間的非一様性を取りこんだ光応答理論の開発を行い、その実例として銀粒子に光学的な力を与えることができることを示しました。この成果は、原子や分子レベルでの究極的な物質操作の技術に繋がると考えています。一方、最近、自己無撞着性の効果を取り込む為に、物質系(電子系)の運動と光(電磁場)の運動を同時に扱う理論及びその数値計算手法の開発に成功しました。また、このように十数ナノメートルを超える物質を計算の対象にする場合、市販の数値計算プログラムや、既存の数値計算手法に基づくプログラムでは膨大な計算時間が掛かってしまい、事実上計算を実行することができません。そこで我々のグループでは、京コンピュータ(神戸理研)で実稼働できる超並列数値計算プログラムの開発も同時に進めています。京コンピュータの全資源を使って66万コア並列の超並列計算も行っており、更なる高速化を進める予定です。

参考文献

- 1) Y. Kubota and K. Nobusada, "Exciton-polariton transmission in quantum dot waveguides and a new transmission path due to thermal relaxation", *J. Chem. Phys.* **134**, 044108 (2011).
- 2) T. Iwasa and K. Nobusada, "Near-field-induced optical force on a metal particle and C_{60} : Real-time and real-space electron dynamics simulation", *Phys. Rev. A* **82**, 043411 (2010).
- 3) T. Iwasa and K. Nobusada, "Nonuniform light-matter interaction theory for near-field-induced electron dynamics", *Phys. Rev. A* **80**, 043409 (2009).
- 4) "Massively-parallel electron dynamics calculations in real-time and real-space: Toward applications to nanostructures of more than ten-nanometers in size", M. Noda, K. Ishimura, K. Nobusada, K. Yabana, T. Boku, *J. Comp. Phys.* **265**, 145 (2014).



<キーワード>

ナノ構造体

電子・電磁場ダイナミクス

量子デバイス

■理論分子科学第一研究部門
新しい多電子理論と化学への応用



柳井 毅(准教授)

1997年東京大学工学部応用化学科卒、1999年同大学院工学系研究科修士、2001年博士(工学)。2001年学術振興会博士研究員、2002年米国Pacific Northwest 国立研究所、同年Oak Ridge 国立研究所博士研究員、2005年Cornell 大学博士研究員を経て2007年1月より現職。

TEL: 0564-55-7301

FAX: 0564-53-4660

mail: yanait@ims.ac.jp

どうして化学結合ができるのか、化合物の構造、色あるいは反応性、また、電場や磁場中の分子の性質あるいは実験の分光スペクトルなどを理解あるいは説明する理論的手法は、近年、コンピュータの高性能化とも相まって実用上大変強力な方法論になってきました。我々の研究室では、分子の化学的性質や反応を解析、予測するための電子状態理論とそのアルゴリズム開発を中心に研究を行っています。化学反応計算や物性予測に用いられる計算(量子化学計算や電子状態計算などと呼ばれるもの)では、分子の電子の運動を量子論の基礎方程式に従い記述することで、分子軌道などの尺度を用いて、分子の反応性や構造を定量的に見積もります。我々の理論手法では、化学現象を電子レベルで記述し、電子状態に表れる量子効果や相対論効果を精度良く取り扱うことで、詳細な物理化学的な解析が可能となります。我々は、高度な物理モデル、数学手法を駆使した強力なアルゴリズムを開発し、またそれらを電算ソフトウェアとして実装し、化学現象の機構解明に向けた最先端の科学技術計算を実現しています。

化学では、価電子の運動やその多体相互作用は大きな役割を果たしています。計算では、その価電子の変化を精度良く追跡する必要があります。我々は、その記述に関する方法論開発を中心に研究を押し進めています。この分野は1980年代に随分進展し、小さな分子に限れば、経験値に頼らず化学的精度で電子状態を記述することが可能です。また、密度汎関数理論に基づく分子軌道計算法は実験研究者にも広く利用されています。しかしながら、大きな分子の複雑な電子状態(励起状態や金属化合物の擬縮

参考文献

- 1) W. Mizukami, Y. Kurashige, T. Yanai "More π Electrons Make a Difference: Emergence of Many Radicals on Graphene Nanoribbons Studied by Ab Initio DMRG Theory," *J. Chem. Theo. Comp.* **9**, 401-407 (2012).
- 2) Y. Kurashige, G. K-L. Chan, and T. Yanai, "Entangled quantum electronic wavefunctions of the Mn-CaO₈ cluster in photosystem II," *Nature Chem.* **5**, 660-666 (2013).
- 3) M. Saitow, Y. Kurashige, and T. Yanai, "Highly scalable multireference configuration interaction theory with internal contraction of density matrix renormalization group wave function," *J. Chem. Phys.* **139**, 044118 (15 pages) (2013).

<キーワード>

電子状態理論

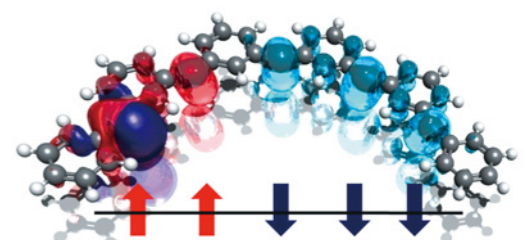
計算化学

擬縮重電子系

重状態、多参照状態)に関する計算の実現には、今なお大きな壁があります。この難しさに対して、我々は最先端の理論やアルゴリズムを駆使あるいは考案し、これまで解析できなかった電子状態を解明する研究を世界に先駆けて進めています。

例えば、共役 π 分子の励起状態やあるスピン状態には、従来の一電子的な描像では理解できない電子状態があり、それらが重要な種々の現象に関与することが知られています。我々は、磁性有機分子の典型系や、最近注目を浴びているグラフェンナノリボンの電子状態を高精度に解析することができています。グラフェンはエッジの形状に起因する特異的な電子構造の上で、 π 電子の集団運動を伴う新奇な電子状態を記述することができました。また、有機磁性体の典型分子を対象として、その磁性体の安定性に関して従来法の結果を覆す新しい理論的説明を示しました。また、多核錯体化合物の構造や関連する反応機構の高精度な計算にも挑戦しています。

これらの成果は、我々独自の電子状態理論、多電子理論の開発によるブレークスルーによってもたらされたものです。我々の研究室では、第一原理に基づく最大規模の多配置電子状態計算を実現する密度行列繰り込み群法を開発し、巨大次元の量子化学ハミルトニアンを対角することに成功しており、それを分子系に応用することができます。また、定量的精度を高める手法開発として、多電子間に働く摂動的な力学効果をハミルトニアンに繰り込むオリジナルな正準変換法を開発しています。以上のように、基礎的な技術開発の成果を統括的に用いて、新しい電子論を確立することを目指しています。



大規模有機磁性分子(ポリカルベン)のスピン相関の算出および可視化。CAS(46e, 46o)の大規模計算を実現した。低スピン状態に著しい量子ゆらぎが発見された。その安定性から、強磁性の状態(高スピン状態)は相対的に不安定化するという機構を提唱した。

■計算分子科学研究部門

高精度な電子状態理論を核とした新しい理論化学の開拓



江原 正博(教授)

1988年京都大学卒業、1993年同大学院博士課程修了、博士(工学)。基礎化学研究所博士研究員、ハイデルベルグ大学博士研究員、1995年京都大学助手、2002年助教授を経て、2008年6月より現職。

TEL: 0564-55-7461

FAX: 0564-55-7025

mail: ehara@ims.ac.jp

様々な化学現象は分子の電子状態に基づいて発現しています。私たちは、電子状態理論を用いて化学現象の本質を明らかにし、新しい化学概念を構築することを目的として研究を行っています。とくに、高精度な励起状態理論を開発し、理論分光や光物性化学など主に光の関わる化学現象について研究を進めています。現在の主な研究テーマは以下のとおりです。

(1)高精度電子状態理論の開発

分子の励起状態には複雑な電子構造をもつ状態がありますが、励起状態の理論研究ではこれらを正確に記述することが重要になります。私たちは、複雑な電子状態にも高精度な理論SAC-CI General-R法を開発し、極めて精度の高い研究を可能にしました。最近では、より効率的に複雑な電子状態を記述できるActive space法や、励起状態における溶媒効果を記述することができるPCM-SAC-CI法を開発しました。現在、理論の高精度化と大規模化を軸として「有用な高精度電子状態理論」の開発を進めています。

(2)理論精密分光

分子分光では様々な新しい現象が発見されていますが、それらの解明には理論の正確な情報は極めて重要です。私たちはバレンス励起から内殻電子過程まで広いエネルギー領域の分子分光について精密な理論研究を行ってきました。内殻電子過程の研究では複雑な電子状態の詳細を明らかにしました

(図1)。最近、2電子イオン化状態の分子分光によって、内殻イオン化にともなう緩和エネルギーや原子間緩和エネルギーを抽出できることを理論的に示しました。高精度な理論に基づく分子分光の新しい展開を目指しています。

(3)光物性科学

発光材料では分子の励起状態が鍵であり、励起状態の精密な理論研究によってその光物性の詳細を明らかにすることができます。私たちは、有機ELやバイオセンサーなどの光電子過程について研究を行ってきました。高分子系の有機EL分子では柔軟な分子構造に基づく統計的性質が重要であることを明らかにしました(図2)。最近では、紫外線を遮蔽する分子の光学的性質や有機EL分子における溶媒効果や振動構造を考慮した電子スペクトルの理論解析を行いました。精密な電子状態理論を用いて、光機能分子の電子過程について研究を行っています。

(4)表面触媒・表面光化学

表面反応は、無限系と有限系の接点の現象であり、理論的にも大変興味深い研究対象です。そこでは固体表面と吸着分子の相互作用が本質であり、表面一分子系の理論モデルが鍵となります。表面一分子系の電子交換を記述する理論によって燃料電池のアルコール酸化反応などを研究しています。また、金属クラスターにおける化学反応の研究もスタートしました。表面光化学にも興味を持っています。

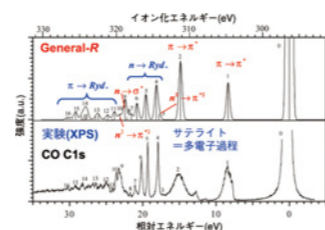


図1: COのC1s内殻イオン化サテライトスペクトル

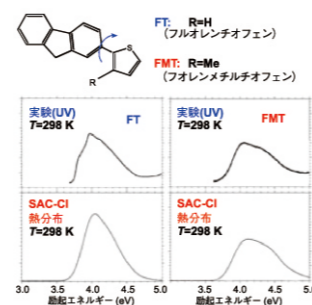


図2: フルオレンチオフェンと置換体の構造と励起スペクトル

参考文献

- 1) 江原、「高精度電子状態理論の開発と応用」化学と工業、6月号, pp. 576-578 (2008).
- 2) M. Ehara, H. Nakatsuji, "Development of SAC-CI general-R Method for Theoretical Fine Spectroscopy", in *Recent Progress in Coupled Cluster Methods: Theory and Applications*, pp. 79-112, edited by P. Carsky, J. Pittner, J. Paldus (Springer, 2010).
- 3) R. Cammi, R. Fukuda, M. Ehara, H. Nakatsuji, "SAC-CI Method in the Polarizable Continuum Model-Theory for Solvent Effect on Electronic Excitation of Molecules in Solution", *J. Chem. Phys.* **133**, 024104-1-24 (2010).
- 4) M. Tashiro, M. Ehara, H. Fukuzawa, K. Ueda, C. Buth, N. Kryzhevoi, L.S. Cederbaum, "Molecular Double Core-Hole Electronic Spectroscopy for Chemical Analysis", *J. Chem. Phys.* **132**, 184302-1-11 (2010).

〈キーワード〉

励起状態理論

理論分光

光物性化学

表面反応

■計算分子科学研究部門

新しい分子動力学シミュレーション手法の開発と生体分子への応用



奥村 久士(准教授)

1998年慶應義塾大学理工学部卒業、2002年同大学院理工学研究科博士課程修了、博士(理学)。東京大学工学系研究科日本学術振興会特別研究員(PD)、分子科学研究所助手、名古屋大学大学院理学研究科COE特任講師、ラトガース大学研究助教授を経て2009年5月より現職。

TEL: 0564-55-7277

FAX: 0564-55-7025

mail: hokumura@ims.ac.jp

タンパク質は、多数のアミノ酸がペプチド結合によりつながったもので、そのアミノ酸の並び方(一次元配列)はタンパク質の立体構造を決める重要な要素となります。アミノ酸の一次元配列情報をもとにタンパク質の立体構造を予測する問題をタンパク質の折りたたみ問題といます。タンパク質の折りたたみ問題が難しい理由は、通常のシミュレーション手法では多くのタンパク質構造を探索するために非常に長い時間シミュレーションを行わなければならないからです。

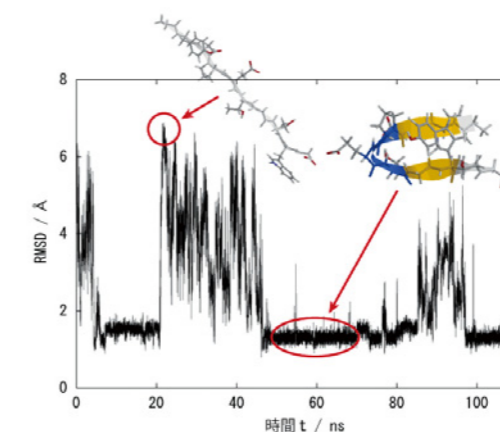
この問題を解決するためこれまでに有力な手法がいくつか提案されてきました。それでもこれまでの方法では温度や圧力を変えたときの構造の変化を理論的に研究することはできませんでした。私はこの問題を解決するための有力な手法「マルチバリック・マルチサーマル法」を最近提案しました。この方法ではシミュレーションの最中に温度を上げたり下げたりすると同時に圧力を上げたり下げたりします。こうするとタンパク質は激しく動くようになります。その結果、図に示すように繰り返しタンパク質を折りたたんだり、ほどこいたりすることに成功しました。また温度を上げたり、圧力をかけたりするとどのようにタンパク質が壊れるかも明らかにしました。今後この方法を用いることにより高温・高圧下での生体分子の構造と機能を理論的に解析できると考えています。

他にもより効率的に構造をサンプルできる手法を開発して、タンパク質の折りたたみ問題に取り

組む予定です。特にアミノ酸の数が50残基を超えるタンパク質を世界で初めて折りたたみ、立体構造の形成過程を原子レベルで明らかにすることを目標としています。さらに医療への応用にも関心を持っています。タンパク質が間違っ折りたたまれることによってひき起こされるフォールディング病という病気があります。アルツハイマー病や人工透析患者にみられる透析アミロイド症がその例です。これらの病気はタンパク質が間違っ折りたたまれ、アミロイドという針状の物質を作ってしまうことが原因ですが、アミロイドが形成されるしくみはまだよくわかっていません。アミロイド形成のしくみが明らかになればアミロイド形成を阻害する薬を開発するための手がかりを得ることが可能になります。当研究室で開発してきた新しい分子動力学シミュレーション手法を使ってアミロイド形成のしくみを明らかにしようという研究も進めています。

参考文献

- 1) H. Okumura, "Optimization of partial multicanonical molecular dynamics simulations applied to an alanine dipeptide in explicit water," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** 114-126 (2011).
- 2) S. G. Itoh, H. Okumura, and Y. Okamoto, "Replica-exchange method in parameter space: overcoming steric restrictions for biomolecules," *J. Chem. Phys.* **132** 134105 (2010).
- 3) H. Okumura and Y. Okamoto, "Temperature and pressure dependence of alanine dipeptide studied by multibaric-multithermal molecular dynamics simulations," *J. Phys. Chem. B* **112** 12038-12049 (2008).



アミノ酸10個からなるタンパク質「シニョリン」のマルチバリック・マルチサーマル分子動力学シミュレーション。天然構造からのずれ(RMSD)が小さくなったり(=折りたたんだり)大きくなったり(=ほどこたり)しています。

〈キーワード〉

分子動力学シミュレーション

拡張アンサンブル法

タンパク質



岡本 裕巳(教授)

1983年東京大学理学部卒、
1985年同大学大学院理学系
研究科博士課程中退、1991年
理学博士。1985年分子科学研
究所助手、1990年東京大学理
学部助手、1993年同助教授を
経て、2000年11月より現職。

TEL: 0564-55-7320

FAX: 0564-54-2254

mail: aho@ims.ac.jp

〈キーワード〉

近接場光学顕微鏡

光学イメージング

ナノ物質

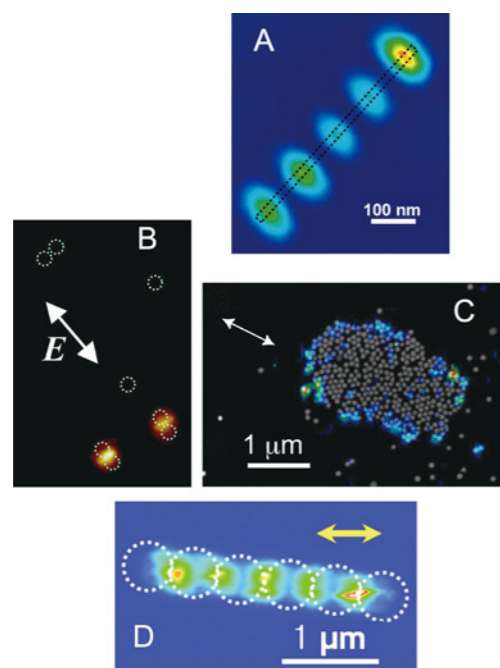
貴金属微粒子

■光分子科学第一研究部門

新しい光学顕微鏡でナノ物質の励起状態を探る

従来の光学顕微鏡では、光の波長(可視光で0.5 μm程度)より小さい形を見ることができませんでした。最近、近接場光学顕微鏡という新しい方法が開発され、それによってナノメートルサイズの物質の観察が可能になりました。ナノサイズ物質のカラー写真(即ちスペクトル情報)を撮ることができ、また私たちの研究室の装置では、100兆分の1秒単位の極めて短時間内に起きる超高速の変化を、刻一刻、場所ごとに調べることもできます。カラー写真が撮れるのは光を使ってこそできるのは当然ですが、超高速の現象をとらえることも、光を使って初めて可能になります。また私たちは、貴金属からできたナノ物質では、物質の特性に深く関わる「波動関数」がこの方法で観察できることも見いだしました。このような方法でナノ物質の新しい性質を光で調べ、光で制御する基礎的な研究を行っています。

貴金属ナノ微粒子をある一定の構造で集合させて配列構造を作ると、光を照射したときに、局所的に非常に強い光(金属微粒子のない場合に比べて、最大数百万倍)が発生する場合がありますと考えられていて、様々な利用価値があります。通常の光学顕微鏡ではナノサイズの小さいものを見ることができないので、このような光の場を観察することもできませんが、私たちは、独自に開発した近接場光学顕微鏡を用いて、発生した強い光の場を、実際に

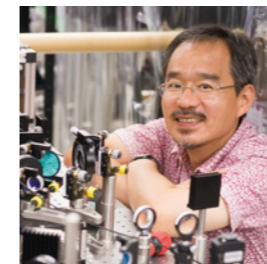


イメージとして観察することができました。例えば、微粒子が2個連結した構造では粒子間の隙間に強い光が発生しているのが観察され、これは理論による予測に良く一致します。一方、多数の微粒子が集まって島状の構造を作ると、島の辺縁部に強い光が集中することがわかり、これはこれまで予想されていなかった基礎的な知見です。また最近、同じ近接場光学顕微鏡を用いた実験で、ナノサイズの孔を通ってくる光が、その孔よりも大きなナノサイズの貴金属の板をかぶせることで、板をかぶせる前よりも強くなる(つまり、孔に金属板で蓋をすると、孔を通る光が強くなる)という、奇妙な現象を見いだしました。解析の結果、貴金属の微粒子が持つ光を集める特異な性質が、この現象に深く関わるということがわかってきました。このような研究を進展させて、ナノ構造物質の励起状態に関わる分子科学を進展させて行きたいと考えています。

参考文献

- 1) H. Okamoto and K. Imura, "Near-Field Optical Imaging of Enhanced Electric Fields and Plasmon Waves in Metal Nanostructures," *Prog. Surf. Sci.* **84**, 199-229 (2009).
- 2) K. Imura, K. Ueno, H. Misawa, and H. Okamoto, "Anomalous Light Transmission from Plasmonic Capped Nano-Apertures," *Nano Lett.* **11**, 960-965 (2011).

金でできた様々なナノ構造体の近接場光学イメージ。A: 単一のロッド状金ナノ微粒子(長さ540nm)。波動関数の振幅が可視化されている。B: 球状金微粒子(直径100nm)の二量体。微粒子間の隙間に強い光が観察される。C: 球状金微粒子(直径100nm)の島状集合体。辺縁部に強い光が局在する。D: 金薄膜上に円形の孔を6個並べて開けたもの。孔と孔の間の空間に光が局在する。



大島 康裕(教授)

1984年 東京大学理学部卒、
同大学院理学系研究科修士
課程修了、同博士課程中退
後、東京大学大学院総合文化
研究科助手、京都大学大学院
理学研究科助教授を経て、
2004年9月 分子科学研究所
電子構造研究系教授、2009年
4月より現職、1989年東京大学
博士(理学)。

TEL: 0564-55-7430

FAX: 0564-54-2254

mail: ohshima@ims.ac.jp

〈キーワード〉

分子運動

量子波束

コヒーレント制御

強レーザー場科学

■光分子科学第一研究部門

分子運動量子状態のデザインと再構築

紙の上に書いた分子式は分子の骨組みだけを教えてくれますが、実際の分子は空間を飛行し、回転し、振動しています。室温の条件であっても、典型的な分子で1秒間に300m飛び回り、 10^{11} 回も回転し、振動は $10^{12} \sim 10^{13}$ 回に達します。このように激しく運動する分子の姿をありありと捉えること、その上で、分子の運動を自在に操作することを、私たちは目指しています。

激しく運動する存在としての分子は、19世紀中ごろのマックスウェルやボルツマンによる気体運動論によって認識されるようになり、20世紀初頭における量子力学の成立ならびに分光学的研究の蓄積によって、物理学的描像が確立しました。今では、どのような基本的な化学の教科書でも、分子の振動や回転運動を量子力学的に表現する「波動関数」について記載されています。しかし、波動関数を実験的に決定すること(専門的には「量子状態の再構築」と呼ばれます)は、実は、依然として大きなチャレンジとして残されています。極微の存在である分子を1つ1つ観察することは困難であり、多数個の集団として観測する必要があります。分子がおのおの勝手に運動していると、平均化のために多くの情報が失われてしまうので、全ての分子がそろって運動するようにコントロールする必要があるからです。

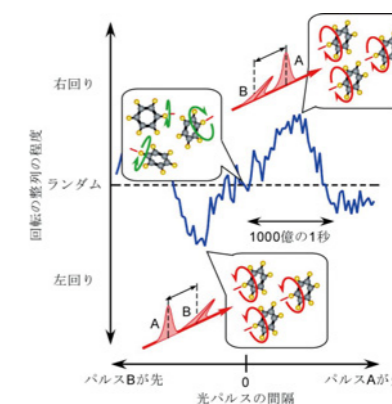
分子運動をコントロールするために、私たちはレーザー光を活用します。まず、分子を1ケルビン以下の極低温状態に冷却して運動をストップさせたのち、1ピコ秒(1兆分の1秒)よりも短い強力な光

参考文献

- 1) H. Hasegawa and Y. Ohshima, "Decoding the state distribution in a nonadiabatic rotational excitation by a nonresonant intense laser field," *Phys. Rev. A* **74**, 061401-1-4(R) (2006).
- 2) H. Hasegawa and Y. Ohshima, "Quantum state reconstruction of a rotational wave packet created by a nonresonant intense femtosecond laser field," *Phys. Rev. Lett.* **101**, 053002-1-4 (2008).
- 3) K. Kitano, H. Hasegawa, and Y. Ohshima, "Ultrafast angular-momentum orientation by linearly polarized laser fields," *Phys. Rev. Lett.* **103**, 223003-1-4 (2009).
- 4) Y. Ohshima and H. Hasegawa, "Coherent rotational excitation by intense nonresonant laser fields," *Int. Rev. Phys. Chem.* **29**, 619-663 (2010).

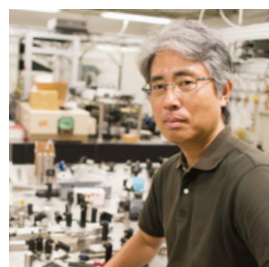
パルスを用いて瞬間的に分子に撃力を加え、運動を励起します。このような「撃力」光による状態分布の変化を精密に測定する方法を、私たちは独自に開発しました。さらに、レーザーパルスを適切な時間間隔で2発続けて照射することにより、そろって右回りもしくは左回りに回転させることにも成功しています。パルス間隔は分子の回転周期(10ピコ秒)程度で、この時間内で回転方向の整列が完了します。そのために、回転のタイミングをきれいにそろえることができ、また、パルス間隔を変えるだけで回転の向きを反転させることもできます。

そろって回転する分子の集団を作り出すことに成功したことは、超高速で運動する分子を「撮影」することへとつながる重要なステップであり、近い将来、「粒子であるとともに波としての性質を持つ」というミクロスケールの物理法則に支配された分子の世界を、明確に視覚化できると期待しています。さらに、撃力光による分子運動の励起は、回転ばかりでなく振動運動にも適用できます。実際に、弱い分子間力で結合した分子集合体である分子クラスターを対象として、大振幅な分子間振動の励起を実現しています。今後は、異性化を効率的かつ選択的に誘起するような、エキゾチックな運動状態を作り出すことに挑戦する予定です。このような研究を更に進めることによって、真に量子論的な枠組みのなかで「望ましい反応のみを進行させる」ための指導原理の確立を目指したいと考えています。



2つの極短光パルスを照射することにより、右回りもしくは左回りにそろって分子が回転する状態を作り出すことができる。2つの光パルス間の時間間隔をピコ秒程度で調整すると、回転方向が反転する。

■光分子科学第二研究部門
アト秒量子エンジニアリング



大森 賢治(教授)

1987年東京大学卒業、1992年同大学院工学系研究科博士課程修了、工学博士。東北大学助手・助教授を経て2003年9月より現職。2001年～現在JST CREST事業併任、2004年～2005年東北大学客員教授併任、2007年～2008年東京工業大学客員教授併任、2009年～2011年東京大学客員教授、2012年～ハイデルベルグ大学客員教授、2014年～ストラスブール大学客員教授。
TEL: 0564-55-7361
FAX: 0564-54-2254
mail: ohmori@ims.ac.jp

〈キーワード〉

- アト秒
- ・
- コヒーレント制御
- ・
- 量子力学
- ・
- 波束
- ・
- 分子コンピューター

「物質は見方によって粒子になったり波になったりする。」量子の世界の本質はここにあります。量子力学が確立してから既に100年近くが経ち、皆さんの日常生活において、コンピューターやCDプレーヤー等、量子力学の応用製品はなくてはならない存在になりました。しかし、人類はまだ量子の世界を完全に理解しておらず、その応用の余地も膨大に残されています。私たちは、量子の世界をより良く理解するために、原子や分子の波としての性質を光で完全に制御するというテーマに挑戦しています。

私たちは、分子の中の電子や原子の波にアト秒(アト=10⁻¹⁸)レベルで制御されたレーザー電場の振幅(振動の幅)と位相(振動のタイミング)の情報を完全に転写することによって、それらが干渉してできる量子力学的な時空間模様をピコメートル(ピコ=10⁻¹²)・フェムト秒(フェムト=10⁻¹⁵)レベルの時空間分解能で多彩に加工し可視化することに成功しました(下図)。^{1,2)} この研究成果は、多くの新聞やYahoo!ピックス等で大きく取り上げられ、社会的にも反響を呼びました。さらに私たちは、この技術を用いて、1個の分子で世界最速レベルのスーパーコンピューターの1000倍以上の速さでフーリエ変換を実行することのできる分子コンピューターの開発に成功しました。³⁾ この成果は、朝日新聞や中日新聞を始めとする新聞各紙で取り

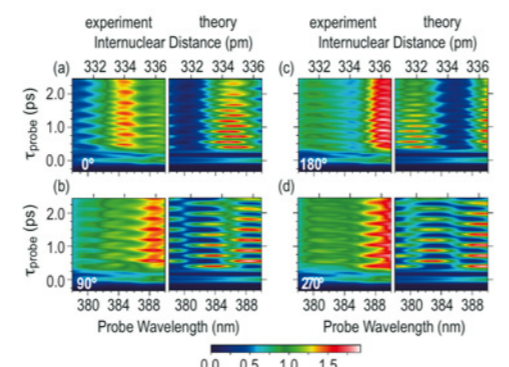
参考文献

- 1) "Visualizing picometric quantum ripples of ultrafast wave-packet interference," H. Katsuki, H. Chiba, B. Girard, C. Meier, and K. Ohmori, *Science* **311**, 1589-1592 (2006).
 - 2) "Actively tailored spatiotemporal images of quantum interference on the picometer and femtosecond scales," H. Katsuki, H. Chiba, C. Meier, B. Girard, and K. Ohmori, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 103602 (2009).
 - 3) "Ultrafast Fourier transform with a femtosecond laser driven molecule," K. Hosaka, H. Shimada, H. Chiba, H. Katsuki, Y. Teranishi, Y. Ohtsuki, and K. Ohmori, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 180501 (2010).
- Selected for "Editors' Suggestions" in PRL.
Covered by "Viewpoints" in *Physics*; *Physics* **3**, 38 (2010).
Covered by "Research Highlights" in *Nature*; *Nature* **465**, 138-139 (2010).
 - 4) "Strong-laser-induced quantum interference," H. Goto, H. Katsuki, H. Ibrahim, H. Chiba, and K. Ohmori, *Nature Physics*, **7**, 383-385 (2011). (DOI:10.1038/NPHYS1960)
 - 5) "All-optical control and visualization of ultrafast two-dimensional atomic motions in a single crystal of

上げられた他、英国の科学雑誌Nature、米国物理学会の週刊誌Physics、ドイツ物理学会誌Pro-Physik、あるいはScienceDaily、EurekAlert、PhysOrg、PopSciなど各国の一般向け科学メディアで大きく報道される等、世界的な注目を集めました。そしてつい最近、この分子コンピューターの中の量子力学的な情報を外部から書き換える革新的な光技術を開発することに成功しました。⁴⁾ この成果は、中日新聞を始めとする国内各紙で大きく取り上げられた他、Nature Physics誌のNews and Views欄においてハイライト論文として取り上げられる等、世界的に大きな反響を呼んでいます。

私たちの一連の研究は、これまでに無い新しい概念を分子科学に導入するものであり、これによって「アト秒時空間量子エンジニアリング」という新たな学術分野が開拓されました。今後、アト秒時空間量子エンジニアリングが、物性科学や情報科学など多くの分野を融合した学際的な研究領域を形成し、化学反応制御や量子情報処理などの量子テクノロジーの開発に続く新たな扉を開いていくものと期待されます。これらの研究の途上で、「物質の波としての側面と粒子としての側面がどんなふう共存しているのか?」そんな100年の謎を解くためのヒントが見つかるかもしれません。

bismuth," H. Katsuki, J.C. Delagnes, K. Hosaka, K. Ishioka, H. Chiba, E.S. Zijlstra, M.E. Garcia, H. Takahashi, K. Watanabe, M. Kitajima, Y. Matsumoto, K.G. Nakamura, and K. Ohmori, *Nature Communications* **4**, 2801 (2013). (DOI:10.1038/ncomms3801)



アト秒ピコメートル精度でデザインし可視化された波束干渉の時空間模様。ヨウ素分子内で対向して運動する2個の振動波束の相対位相を(a) 0度; (b) 90度; (c) 180度; (d) 270度に固定した。文献2)から引用。

■光分子科学第三研究部門
放射光を利用した分子科学:分子間相互作用系の局所解析



小杉 信博(教授)

1976年京都大学卒、1981年東京大学大学院理学系研究科修了、理学博士。日本学術振興会奨励研究員、東京大学理学部助手・講師、京都大学助教授を経て1993年1月より現職。1994年～2010年、2014年～UVSOR施設長併任。1996年カナダ・マックマスター大学、2008年フランス・P&Mキュリー(パリVI)大学、2011年フランス・パリ南(パリXI)大学、2013年ドイツ・ベルリン自由大学・客員教授。
TEL: 0564-55-7390
FAX: 0564-54-7079
mail: kosugi@ims.ac.jp

〈キーワード〉

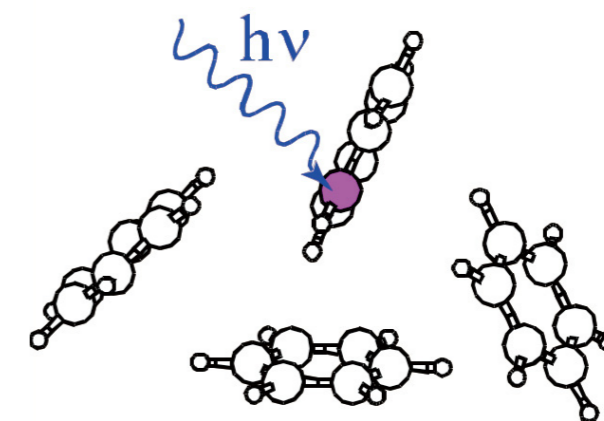
- X線分光
- ・
- 内殻励起
- ・
- 局所電子構造解析
- ・
- 分子間相互作用

分子の中の電子には、分子を構成する原子の原子核の近くに強く拘束されている内殻電子と、原子同士を結びつけたり、分子同士を結びつけたりする糊の働きをしている価電子があります。X線のようにエネルギーが大きくて目に見えない光やエネルギーが小さくて目に見える光(可視光)で分子の中の電子が励起される様子は、光の吸収スペクトルからわかります。X線は内殻電子、可視光や紫外線は価電子を励起します。内殻電子、価電子は同じ行き先(空の分子軌道)に励起されますが、吸収スペクトルは随分違って見えます。これは、X線吸収スペクトルでは内殻電子がもっていた原子のごく近くの成分だけ抽出されるからです。分子の中の特定原子の内殻電子を次々と選んで励起させることで、分子の局所電子構造解析が実現できます。我々の研究グループでは、実験、理論両面から内殻励起の分子科学の構築のために、X線局所電子構造解析法の基礎と応用に長年取り組んでいます。

基底状態の分子からつくりだされる内殻励起状態には基礎的な観点から興味深い課題がいろいろあります。内殻軌道から空の分子軌道に電子が単に励起するだけではなく、同時に価電子も空の分子軌道に励起する多電子励起状態、内殻電子が系の外に飛び出すエネルギーしきい値直前に弱く束縛された一連の広がった励起状態("励起子")、

しきい値を越えて系外のはるか彼方(連続状態)に勢いよく飛び出していく電子が分子に引き戻されるかのように見える共鳴状態などがあり、吸収スペクトルを複雑にします。また、X線を吸収してつくりだされる内殻励起状態は高励起状態なので、励起しても直ちにX線、電子、イオンを放出して、安定な状態に落ちていきます。落ちた先の価電子励起状態は、可視光や紫外線を吸収してできた価電子励起状態とは違う構造になっていて、構造変化のダイナミクスを追うことも可能です。

現在、分子クラスター、固体表面分子層、固体中の不純物分子、液体分子、溶質・溶媒分子などの分子間相互作用系の局所電子構造を解明するため、世界トップレベルの高分解能・高輝度性能を誇る分子科学研究所のシンクロtron光源加速器施設(UVSOR施設)において、独自開発の実験装置群を利用した研究を行っています。最近の分光技術では100eVを越えるX線領域でも1meV精度の高分解能実験が可能であり、注目した原子サイトに影響を及ぼしている弱い相互作用までも抜き出して明らかにできます。例えば、溶媒分子を溶質に近接したものとそれ以外に分離して、その配位構造や電子構造を解明することができます。バンド形成がはっきりしなかった弱い分子間相互作用を持つ有機薄膜のバンド形成の観測も可能です。



X線を使うと化学的環境の異なる原子を一つずつ選択して内殻励起でき、局所電子構造解析が可能となる

■光分子科学第三研究部門
機能性大型分子材料の光・電子物性評価



解良 聡(教授)

1996年千葉大学工学部卒、
1998年日本学術振興会特別
研究員、2001年千葉大学大
学院自然科学研究科修了(博士
(理学))、千葉大学大学院助手、
ブルツブルグ大学ポスドク
研究員、千葉大学大学院融合
科学研究科准教授を経て、
2014年4月より現職。
TEL: 0564-55-7413
mail: kera@ims.ac.jp

情報化社会の発展、エネルギー・環境問題から、電子デバイスの軽量化・フレキシブル化など、既存の無機材料技術では困難な要求が人類に突きつけられています。これに回答すべく、有機半導体と呼ばれる機能性大型分子群の特性を利用した様々なソフトデバイスの研究が賑わいを見せ、多彩な構造の分子材料が日夜設計・開発されています。しかし依然として個々の分子の特性を区別し、要望されるデバイスの中で適切な材料として自在に活用することができていません。これは本来の特性として絶縁物たる分子群が「有機半導体」として材料機能を示す理由とその真の特性を認識できていないことに帰着します。具体的には、デバイスにおける無機物(金属電極)との界面における分子の変性はもちろんのこと、構造異方性の高い異分子間界面の原子レベルでの相互作用についての理解が全く不十分であるということです。また物性の発現機構や原理、その制御のための量子論的な中身が全く明確でなく、適切なガイドラインが構築されぬまま手探り状態の応用研究が続けられていることを意味します。

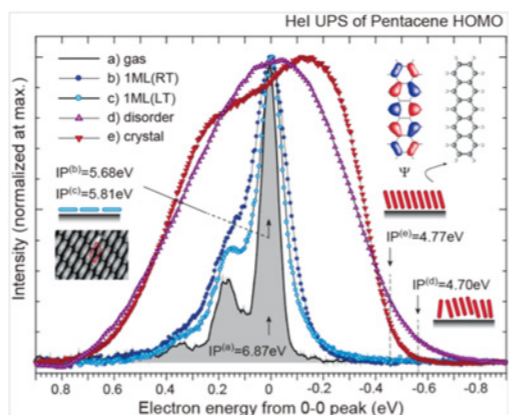
光電子分光法による電子状態評価は「分子の中の電子の姿」を量子論的に明らかにする上で極めて有効ですが、分子材料に対する実験的な難しさ(試料作製、光損傷や帯電回避など測定技術)などから、電気伝導特性の中身とリンクさせることが容易ではありませんでした。最近になってようやく技術が浸透し、高感度紫外光電子分光の実現による研究成果

が積み重ねられ、有機半導体の特徴が見始めています。分子固体は、その集合構造に応じて分子間相互作用が異なり、電子の波動性が前面に現れたり、粒子性が強調されたりします。機能性大型分子の特徴は次の3つにまとめられます。(1)分子は弱い相互作用で固体を作るため、固体においても波動関数は分子軌道を保存し、電子はほぼ分子内に局在化します。(2)分子の低い対称性から、波動関数は空間的に凸凹であり集合構造に敏感でかつ非連続系です。そのため分子の個性だけで固体物性は決まらず、集合体における僅かな変調により生じた「新たな個性」の二面性を併せ持ちます。つまり分子は柔らかく、弱い外的摂動で容易に変化します。(3)分子は軽元素で構成されますが、電子の入れ物としての量子構造体と考えると、一つ一つの分子は非常に大きく重いフォノンの影響を受けやすくなります。特に振動による分極の歪をまとった準粒子が分子内に局在した状態から周辺の数分子へと、電荷の輸送時間スケールに応じて空間変動する点が特徴であることがわかってきました。

今後は分子膜における強い電子・振動結合状態や、再配向エネルギーが僅かな相互作用により変化する現象や、波動関数の局在性により誘起される強い電子相関など、分子軌道の「局在性の度合い」に依存した物理現象に着目し、機能性大型分子の最たる特徴である、弱い相互作用とその電子状態について重要な話題を提供していきたいと考えています。

参考文献

- 1) N. Ueno, S. Kera, "Electron spectroscopy of functional organic thin films: Deep insights into valence electronic structure in relation to charge transport property", *Prog. Surf. Sci.* **83**, 490-557 (2008).
- 2) S. Kera, H. Yamane, N. Ueno, "First principles measurements of charge mobility in organic semiconductors: Valence hole-vibration coupling in organic ultrathin films", *Prog. Surf. Sci.* **84**, 135-154 (2009).
- 3) F. Bussolotti, S. Kera, N. Ueno, "Potassium doping of single crystalline pentacene thin film", *Phys. Rev. B* **86**, 155120-1-9 (2012).
- 4) F. Bussolotti, S. Kera, K. Kudo, A. Kahn, N. Ueno, "Gap states in pentacene thin film induced by inert gas exposure", *Phys. Rev. Lett.* **110**, 267602-1-5 (2013).
- 5) J.-Q. Zhong, X. Qin, J.L. Zhang, S. Kera, N. Ueno, A.T.S. Wee, J. Yang, W. Chen, "Energy level realignment in weakly interacting donor-acceptor binary molecular networks", *ACS Nano*, **8**, 1699-1707 (2014).

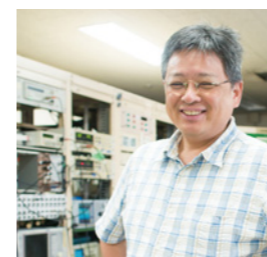


ペンタセン分子の集合状態に依存した最高占有準位HOMOの状態変化

<キーワード>

- 有機半導体物性
- 波動関数分布
- 弱い相互作用
- 自己組織化
- 電子分光

■光源加速器開発研究部門
相対論的電子ビームを用いた光発生



加藤 政博(教授)

1981年東北大学理学部卒、
1986年東京大学大学院理
学系研究科中退、理学博士。
高エネルギー加速器研究機
構物質構造科学研究所助手
を経て2000年3月分子科学
研究所助教授着任、2004年
1月より現職。
TEL: 0564-55-7206
FAX: 0564-54-7079
mail: mkatoh@ims.ac.jp

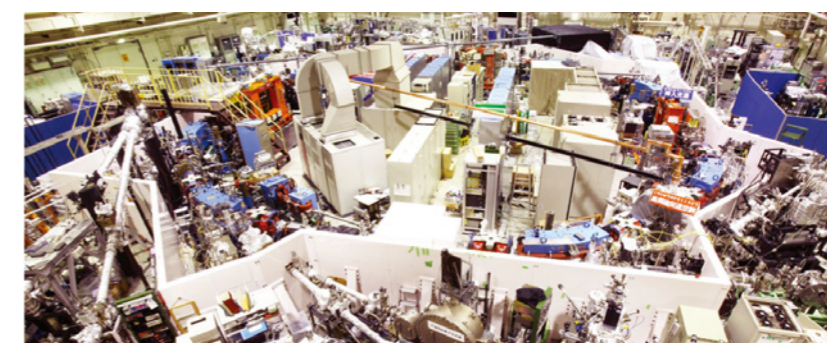
分子科学研究所の保有する電子加速器UVSORは30年近く前に建設されたシンクロトロン光源です。周長53m、電子エネルギー7.5億電子ボルトと比較的小型で、テラヘルツ波から軟X線といったシンクロトロン光としては比較的低エネルギー(長波長)の領域を得意とします。何度かの改造を経て、現在でも、同種の装置の中では世界最高水準の高性能を誇ります。私たちの研究グループでは、このUVSORの性能向上を図りながら、高エネルギー電子ビームを使った光発生に関する研究を行っています。

高エネルギー電子が強磁場中を走るときに発する強力な白色光がシンクロトロン光です。テラヘルツ波からX線まで広大な波長域で高い指向性、偏光特性を有する光です。このシンクロトロン光が本来持っている特性を十分に引き出すには、指向性、強度、安定性に優れた電子ビームが必須です。最新の加速器技術の導入、独自の技術開発により、世界最高水準の高品質電子ビームの生成を目指して研究を続けています。電子ビームの指向性を高めるビーム収束系の開発、電子ビーム強度を安定に保つビーム入射法の開発などに取り組んでいます。また、より強力なシンクロトロン光を発生するための挿入型光源と呼ばれる装置の開発にも取り組んでいます。

シンクロトロン光は優れた光源ですが、レーザーのようなコヒーレントな光源ではありません。我々は、レーザーのような特質を持つシンクロトロン光、すなわち、コヒーレントシンクロトロン光の発生に関

する研究を進めています。シンクロトロン光を光共振器の中に閉じ込め電子ビームと繰り返し相互作用させることでレーザー発振が実現できます。自由電子レーザーと呼ばれる技術です。UVSORに装着されている自由電子レーザー装置は安定性や強度で世界最高水準にあります。自由電子レーザー光を様々な利用実験に供給する一方で、自由電子レーザー発振に関する基礎研究を行っています。電子ビームと外部から導入したレーザー光を相互作用させることで、テラヘルツ波や真空紫外領域でコヒーレント光を発生することにも成功しています。レーザーを利用して電子ビームの密度構造を制御することで、シンクロトロン光の波長・強度・位相などを制御することができます。電子ビームの運動を制御することで偏光を制御することもできます。また、レーザー光を電子ビームに衝突させることでガンマ線を作り出すこともできます。エネルギー可変、偏光可変、超短パルスのガンマ線の発生に成功しています。

UVSORは高い電子ビーム性能を誇りながら、加速器としては比較的小型で小回りが利きます。上記のような光発生に関する基礎研究を行うには最適な施設です。今後さらに、実用化も意識しながら、研究を進めていきたいと考えています。また、超高輝度電子蓄積リングや直線型加速器を用いた自由電子レーザー装置など、将来の施設の全面更新に備えた次世代シンクロトロン光源の設計検討にも着手しています。



UVSOR-II電子蓄積リング

<キーワード>

- シンクロトロン光
- 加速器
- 電子ビーム
- レーザー

■光物性測定器開発研究部門

電子構造の直接観測による固体物性の発現機構の解明



田中 清尚(准教授)

2000年東京大学理学部卒業、
2005年東京大学大学院理学
研究科博士課程修了、理学
博士。米国スタンフォード大学
及びローレンスバークレー
国立研究所博士研究員、大阪
大学助教、特任准教授を経て
現職。

TEL: 0564-55-7202

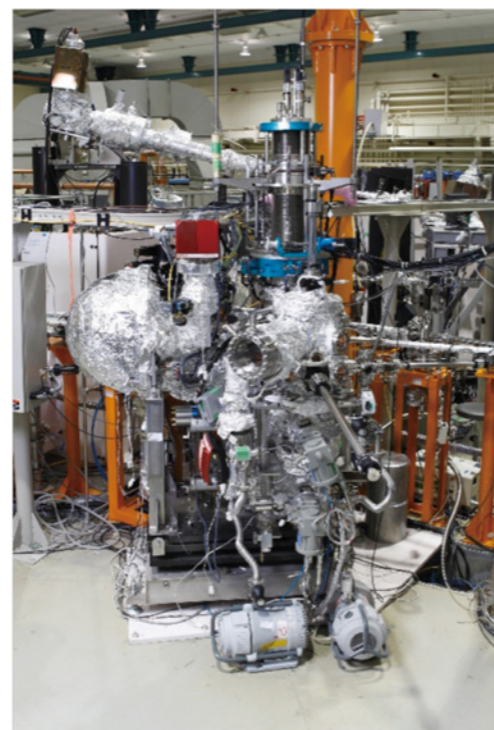
mail: k-tanaka@ims.ac.jp

近年、強相関電子系とよばれる物質群が話題を集めています。これらの物質中では、電子の密度が非常に高いため電子同士が互いに強く相互作用しあっていて、固体物理学の基本理論であるバンド理論では電子の運動を説明できません。そして従来理論の予想を遥かに超えたきわめて多彩で面白い物性、例えば高温超伝導、巨大磁気抵抗、非フェルミ液体などが出現することが最近の研究でわかってきました。このような、強相関電子系の物質は、電子の電荷・スピン・軌道を制御することで、これまでのエレクトロニクスを凌駕するスピントロニクス、強相関エレクトロニクスの電子デバイスになる可能性を秘めており次世代のエレクトロニクスを担う物質として期待されています。

これらの物性は、物質のフェルミ準位のごく近傍の電子状態が担っていて、その電子状態を観測することは物性発現機構の理解、そして新物性の発見に

は欠かせません。われわれのグループは、UVSOR-IIのシンクロトロン光を使って、強相関伝導系物質の分光実験を行うことで、電子状態を直接観測する研究を行っています。シンクロトロン光は、テラヘルツ・遠赤外からX線まで切れ目のない連続な光であり、かつ高輝度でかつ偏光特性に優れており、実験室とは違ったまったく新しい分光実験を行うことができます。また強相関電子系物質では、電子の電荷に加えて、スピンの情報が同時に取得できる分光装置の開発を行っています。

このように新奇機能性を生み出す電子構造を観測するためのシンクロトロン光を使った新しい分光法の開発し、様々な物質の物性の発現機構の解明を目指しています。



UVSOR-II BL7Uの
真空紫外3次元角度分解光電子分光ビームライン

参考文献

- 1) K. Tanaka, W.S. Lee, D.H. Lu, A. Fujimori, T. Fujii, Risdiana, I. Terasaki, D.J. Scalapino, T.P. Devereaux, Z. Hussain, Z.-X. Shen, "Distinct Fermi-momentum-dependent energy gaps in deeply underdoped Bi2212." *Science*, **314**, 1910-1913, 2006.
- 2) W.S. Lee, I.M. Vishik, K. Tanaka, D.H. Lu, T. Sasagawa, N. Nagaosa, T.P. Devereaux, Z. Hussain, Z.-X. Shen, "Abrupt onset of a second energy gap at the superconducting transition of underdoped Bi2212." *Nature*, **450**, 81-84, 2007.

〈キーワード〉

強相関電子系

●
シンクロトロン光

●
電子構造

●
光電子分光

■光化学測定器開発研究部門

分子の内殻正孔状態と緩和ダイナミクス



繁政 英治(准教授)

1986年広島大学理学部卒、
1988年大阪大学大学院基礎
工学研究科博士前期課程修了、
1990年東北大学大学院工学
研究科博士後期課程中退、
1997年東京大学博士(理学)。
1990~1999年高エネルギー
物理学研究所(現高エネルギー
加速器研究機構物質構造科学
研究所)助手、1999年5月より
現職。

TEL: 0564-55-7400

FAX: 0564-55-7400

mail: sigemasa@ims.ac.jp

分子は価電子によってその化学結合が維持されていますが、分子内には価電子よりも強く構成原子に束縛されている、内殻電子と呼ばれる電子が存在しています。極端紫外光や軟X線の照射によって、この内殻電子を電離或いは励起した内殻正孔状態が形成されると、引き続いて電子や光子の放出を伴う激しい緩和過程がフェムト秒の時間スケールで起こります。最終的には、イオンや構成原子の放出に通ずる結合の切断、つまり分子解離が高效率で起こります。一般に、軽元素からなる分子では、電子放出を伴う脱励起による緩和過程(オージェ過程)が支配的なので、分子の内殻正孔状態を生成することによって、価電子の直接電離よりもイオン性解離が高效率で起きるのです。このような分子の内殻光励起に起因する電子的脱励起と解離の筋道を解明することは、純粋な学問的興味のみならず、放射線損傷や格子欠陥の生成を始め、生体高分子や生体組織の非可逆的損傷などのメカニズムを理解する上でも極めて重要です。このため、軽元素の内殻励起領域における唯一の連続光源、シンクロトロン光の実用化以来、多くの研究が行われてきました。しかし、長い間、内殻正孔状態の生成は、電子的脱励起に引き続くイオン性解離を引き起こすための引き金程度の役割と考えられてきました。

電子的脱励起過程と解離ダイナミクスをより深く理解するには、これまで広く行われてきた通常の光電子分光やイオン質量分析のみならず、入射光の

偏光ベクトルに対する電子やイオン放出方向の測定や、さらに高度な電子とイオンのベクトル相関の測定が必要になります。我々のグループでは、このような実験研究を、海外の研究者も含めた共同研究として推進しています。特に、軟X線領域の分子科学の興味深い研究対象の一つとして、多電子励起状態の生成と崩壊過程に注目した研究を行っています。多電子励起過程は、分子場中を運動する電子間の相関に基づいて起こると考えられます。つまり、多電子励起状態の理解は我々が"分子"というものを正しく描写するために必要な根本的な情報の一つとして重要なのです。我々は、極端紫外光研究施設(UVSOR)に建設した専用ビームラインを利用して、多電子励起状態の探索を始め、内殻励起分子の特異な挙動や新奇現象の発見を目指した独自の実験手法の開発を含む基礎研究を行っています。

近年、直線加速器を利用して極端紫外光(EUV)より短波長のレーザーを発振させる、自由電子レーザー(FEL)が実用化されました。日本では、世界で二番目となるX線領域のFEL、SACLAの共用が開始されました。その実証機として建設された試験加速器施設においても、EUV-FEL光を利用した様々な研究が展開されています。我々は、このような革新的な短波長レーザー光源を積極的に利用し、短波長レーザー場中の原子や分子の非線形過程という新しい研究課題にも取り組んでいます。

参考文献

- 1) K. Tamasaku, M. Nagasono, H. Iwayama, E. Shigemasa, Y. Inubushi, T. Tanaka, K. Tono, T. Togashi, T. Sato, T. Katayama, T. Kameshima, T. Hatsui, M. Yabashi, and T. Ishikawa, "X-ray two-photon absorption competing against single and sequential multiphoton processes" *Phys. Rev. Lett.* **111**, 043001 (5 pages) (2013).
- 2) H. Iwayama, N. Sisourat, P. Lablanquie, F. Penent, J. Palaudoux, L. Andric, J.H.D. Eland, K. Bučar, M. Žitnik, Y. Velkov, Y. Hikosaka, M. Nakano, and E. Shigemasa, "A local chemical environment effect in site-specific Auger spectra of ethyl trifluoroacetate", *J. Chem. Phys.* **138**, 024306 (6 pages) (2013).
- 3) H. Iwayama, M. Nagasono, J.R. Harries, and E. Shigemasa, "Demonstration of up-conversion fluorescence from Ar clusters in intense free-electron-laser fields", *Opt. Express* **20**, 23174-23179 (2012).

〈キーワード〉

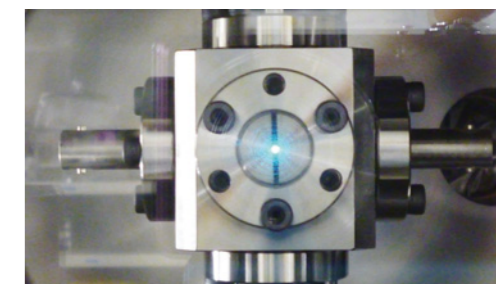
シンクロトロン光

●
内殻電子

●
電子相関

●
短波長レーザー

- 4) M. Nagasono, J.R. Harries, H. Iwayama, T. Togashi, K. Tono, M. Yabashi, Y. Senba, H. Ohashi, T. Ishikawa, and E. Shigemasa, "Observation of Free-Electron-Laser-Induced Collective Spontaneous Emission (Super-fluorescence)", *Phys. Rev. Lett.* **107**, 193603 (4 pages) (2011).



高濃度HeガスにEUV-FELを照射した際に観測された波長501.6 nmの蛍光。励起He原子が集団として一斉に蛍光を放出する、超蛍光と呼ばれる現象のため、非常に高い指向性を持つ。

■先端レーザー開発研究部門
マイクロ固体フォトニクスの研究



平等 拓範(准教授)

1983年福井大学卒、1985年福井大学大学院修士課程修了、同年三菱電機(株)LSI研究所研究員、1989年福井大学工学部助手、1998年2月より現職、東北大学博士(工学)。1993年～1994年文部省長期在外研究員(スタンフォード大学応用物理学科)、2006年パリ第6大学客員教授、2011年ジョゼフ・フーリエ大学客員教授、パリ高等化学学校(ENSCP-Chimie ParisTech)客員教授、2007年～2014年豊橋技術科学大学客員教授、2004年平成16年度文部科学大臣賞(第30回研究功績者)、2008年(財)光産業技術振興協会 第24回櫻井健二郎氏記念賞、2010年米国光学会(OSA)フェロー、2012年国際光学会(SPIE)フェロー、2014年米国電気電子学会(IEEE)フェロー。
TEL: 0564-55-7346
FAX: 0564-53-5727
mail: taira@ims.ac.jp

(キーワード)

マイクロチップレーザー

●
非線形光学

●
マイクロドメイン

●
セラミックレーザー

固体レーザーは、ジャイアントパルスやモードロックなどの高輝度光や極短パルス発生が可能であるため不安定かつ大型で大電力を要するものの先端科学技術の探求には不可欠な存在であります。

本研究グループは、光の波長と同程度のマイクロオーダーで光学材料の性質を制御する事により光波を発生・制御する“マイクロ固体フォトニクス”に関する研究を展開してきました。図1に示すマイクロドメインを制御した新たな固体レーザーによる高性能化が期待されます。すなわち、マイクロチップ共振器(1990年Nd:YVO₄、1993年Yb:YAG、1997年セラミックYAGなど)¹⁻⁵⁾による高コヒーレント光発生、相関制御による高輝度温度のジャイアントパルス発生(ジャイアントマイクロフォトニクス)、コヒーレンス長に合せマイクロドメインの非線形分極を制御する擬似位相整合(Quasi phase matching、QPM)⁶⁾による非線形光学波長変換(1998年バルクPPMgLNなど)などです。そしてこの手法を用いたレーザー素子により、ジャイアントパルス光によるレーザー点火、金属加工を可能とする高出力レーザー、アト秒が望める非線形波長変換超短パルス、高い分解能を有する中赤外光源⁷⁾ ポータブルテラヘルツ光源⁸⁾などが望めるようになりました。興味深いことにマイクロチップレーザーは、従来のメガワット出力レーザーで困難であった、サブナノ秒からピコ秒領域、すなわち従来のパルスギャップ領域(図2)に直接アクセスできます。しかも単色性が高いため物質と強く相互作用でき、種々の非線形現象を引き起こせます。何にしても、従来は自由に発生できなかった時間領域ですから、これまで見逃していた新現象などの探索に有効です。そして、アト秒やそれよりも短い末踏の超短パルス発生にも重要であるとされるなど、マイクロ固体フォトニクスによる時間領域における新展開が期待されます。^{2,5)} 高出力化、高輝度化とともに波長域の開拓を進めてきた結果、手のひらサイズの光源により紫外域からTHz波領域までの広帯域光の発生が可能になりつつあります。(図3)

マイクロ固体フォトニクスを展開する事で、様々な分野の方と共に理化学分野から産業分野にパラダイムシフトをもたらすような分子科学のフロンティア開拓できるでしょう。

参考文献

- 1) T. Taira, A. Mukai, Y. Nozawa and T. Kobayashi, *Opt. Lett.* **16**, 1955-1957 (1991).
- 2) 平等拓範, 日本学術振興会 光エレクトロニクス第130委員会編「光エレクトロニクスとその応用」オーム社, pp. 177-189, pp. 189-222, pp. 247-266, pp. 289-314, pp. 422-442 (2011.5); レーザー学会編「先端固体レーザー」オーム社, pp. 33-96, pp. 97-147 (2011.12).
- 3) T. Taira, J. Saikawa, T. Kobayashi and R. L. Byer, *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* **3**, 100-104 (1997).
- 4) T. Taira, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, **13**, 798-809 (2007). **INVITED**
- 5) T. Taira, [**INVITED**], *Opt. Mater. Express*, **1**, pp. 1040-1050 (2011) : D. G. Rowe, "OUT OF THE LAB: Lasers for engine ignition," *Nature photonics*, **2**, 515-517 (2008): **OSA News Release** <http://www.osa.org/en-us/about_os/newsroom/news_releases/2011/lasersparksrevolution/>, **BBC News** <<http://www.bbc.co.uk/news/science-environment-13160950>>.
- 6) H. Ishizuki and T. Taira, "Half-joule output optical-parametric oscillation by using 10-mm-thick periodically poled Mg-doped congruent LiNbO₃," *Opt. Express*, vol. **20**, no.18, pp. 20002-20010 (2012).
- 7) M. Miyazaki, J. Saikawa, H. Ishizuki, T. Taira, and M. Fujii, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **11**, pp. 6098-6106 (2009).
- 8) H. Minamide, S. Hayashi, K. Nawata, T. Taira, J. Shikata, and K. Kawase, "Kilowatt-peak terahertz-wave generation and sub-femtojoule terahertz-wave pulse detection based on nonlinear optical wavelength-conversion at room temperature," *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, vol. **35**, Issue 1, pp. 25-37 (2014).

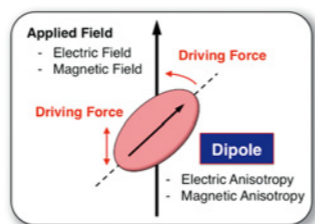


図1:マイクロドメイン制御

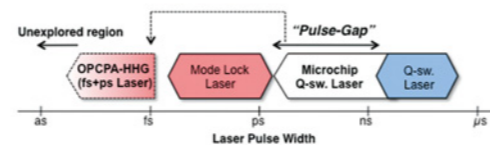


図2:高強度レーザーのパルスギャップとこの充実により拓かれる新たな時間領域

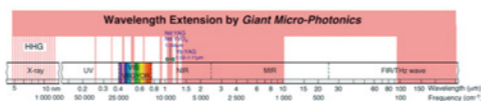
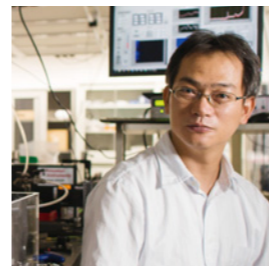


図3:マイクロ固体フォトニクスの進展(ジャイアントマイクロフォトニクス)により可能となった波長域



藤 貴夫(准教授)

1994年筑波大学基礎工学類卒業、1999年同大学大学院工学研究科修士(工学)、1999年東京大学大学院理学系研究科助手、2002年オーストリア・ウィーン工科大学客員研究員(日本学術振興会海外特別研究員)、2004年ドイツ・マックスプランク量子光学研究所客員研究員、2006年(独)理化学研究所研究員、2008年同研究所専任研究員を経て2010年2月より現職。
TEL: 0564-55-7339
FAX: 0564-53-5727
mail: fujii@ims.ac.jp

(キーワード)

レーザー

●
超短光パルス

●
超高速現象

■先端レーザー開発研究部門
超短光パルスの研究

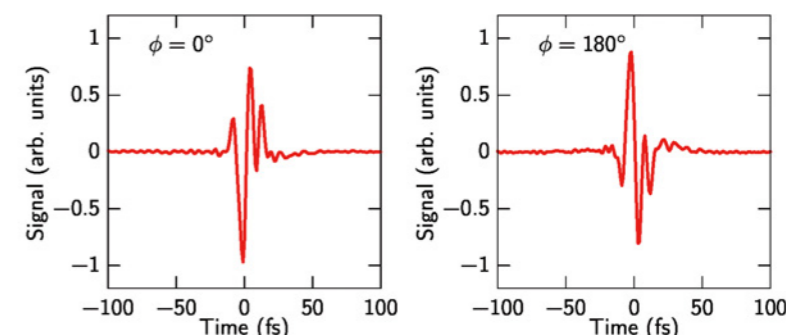
光は、日常生活において非常に身近なものです。光速不変の原理や量子性など、物理学的に興味深いことが多く、現在でも、光の本質についての研究は進められています。

光は電磁波の一種であり、ラジオの電波やX線の仲間ですが、その波の形を実際に観測するという事は、容易ではありません。目に見える光(可視光)の周波数は数百テラヘルツ(THz=10¹²Hz)であり、その周期は1.2フェムト秒(fs=10⁻¹⁵s)と、非常に高速だからです。以前は、光の波を計測する手段として、極端紫外光であるアト秒(as=10⁻¹⁸s)パルスを利用したものがありませんでした[*Science* **305** 1257]。しかし、極端紫外光は、大気で吸収されてしまうので、高真空装置などが必要であり、一般的な応用は考えられませんでした。

藤グループにおいて、2013年に、光の波の振動の様子を直接計測する新しい光技術を開発しました。¹⁾ この光電場計測技術は、アト秒パルスを必要とせず、測定したい光波そのものを利用して、光の

参考文献

- 1) Y. Nomura, H. Shirai, and T. Fuji, "Frequency-resolved optical gating capable of carrier-envelope phase determination," *Nat. Commun.* **4**, 2820 (2013).
- 2) Y. Nomura, H. Shirai, K. Ishii, N. Tsurumachi, A. A. Voronin, A. M. Zheltikov, and T. Fuji, "Phase-stable sub-cycle mid-infrared conical emission from filamentation in gases," *Opt. Express* **20**, 24741-24747 (2012).
- 3) T. Fuji and Y. Nomura, "Generation of phase-stable sub-cycle mid-infrared pulses from filamentation in nitrogen," *Appl. Sci.* **3**, 122-138 (2013).



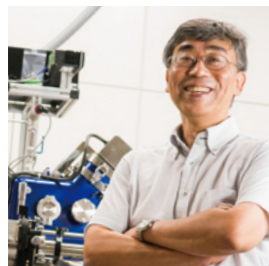
藤グループで開発された技術で計測した光電場。数フェムト秒で振動する光電場を直接的に計測することができた。計測対象の光電場の位相を180度変えることで、電場の向きが反転する様子を観測することができた。

波を計測できる技術です。実験において、数フェムト秒の周期で振動する光電場を明瞭に観測することができました(図参照)。この成果はプレスリリースされ、日刊工業新聞などいくつかの新聞で報道されました。

現在、光ファイバーによる通信では、光の振幅や位相の変調によって、情報をのせています。もし、光電場の波形そのものに情報をのせた通信を行うことができれば、今よりも3桁以上高速に通信ができるようになります。そのような通信技術の実現において、藤グループで開発された光電場の計測技術は極めて重要になると考えられます。

このように、藤グループでは、最先端の光の計測や制御技術、特にフェムト秒やアト秒のような超高速に関する技術を開発します。2010年からスタートした研究室ですが、上記の光電場計測手法の開発の他に、超広帯域コヒーレント赤外光発生^{2,3)}や、それを用いた高速赤外分光法の開発^{4,5)}において成果を上げました。今後もこれらの技術を発展させ、究極的な光の発生、制御、計測法の開発を進めていきます。

- 4) Y. Nomura, Y. T. Wang, T. Kozai, H. Shirai, A. Yabushita, C. W. Luo, S. Nakanishi, and T. Fuji, "Single-shot detection of mid-infrared spectra by chirped-pulse upconversion with four-wave difference frequency generation in gases," *Opt. Express* **21**, 18249-18254 (2013).
- 5) T. Fuji, "Single-shot broadband mid-ir spectra measured in the visible via upconversion," *Laser Focus World* **49**, 9 (2013).



横山 利彦(教授)

1983年東京大学理学部卒業、1987年同大学大学院理学系研究科博士課程中退、理学博士。1987年広島大学理学部助手、1993年東京大学大学院理学系研究科助手、1994年同講師、1996年同助教授を経て、2002年1月より現職。2007年4月より分子スケールナノサイエンスセンター長併任。2011年4月より物質分子科学研究領域主幹併任。
TEL: 0564-55-7345
FAX: 0564-55-7337
mail: yokoyama@ims.ac.jp

■電子構造研究部門

物質分子科学のための新しい分光法の開発

先端材料や素子の特性を評価・解析するにあたって、観測手法の空間分解能や時間分解能がますます求められるようになってきました。我々は、このような社会的要請に応えるため、シンクロトロン放射光やレーザーを用いた分光学的手法に基づいた新しい測定手法の開発とその応用に取り組んでいます。

そのひとつとして、新しい磁気顕微鏡である紫外磁気円二色性光電子顕微鏡を発明しました。これまで、紫外光による磁気円二色性は、シンクロトロン放射光X線に比べ感度が桁違いに悪く、磁気ナノ構造を観測するための光電子顕微鏡(空間分解能10-50nm程度)には応用できないとされてきました。しかし、我々は、光エネルギーを仕事関数に近い値に合わせることで、紫外磁気円二色性がX線と同程度に高感度となるという現象を発見しました。この発見に基づいて、紫外レーザーを用いた紫外磁気円二色性光電子顕微鏡像の観測、さらには、~100フェムト秒の時間分解能をもつ顕微鏡観測、紫外レーザー二光子光電子磁気円二色性およびその顕微測定などを世界で初めて実現しました。磁性薄膜はハードディスクに活用されていますが、メモリ素子としても有望で、微小な磁石の高速切替

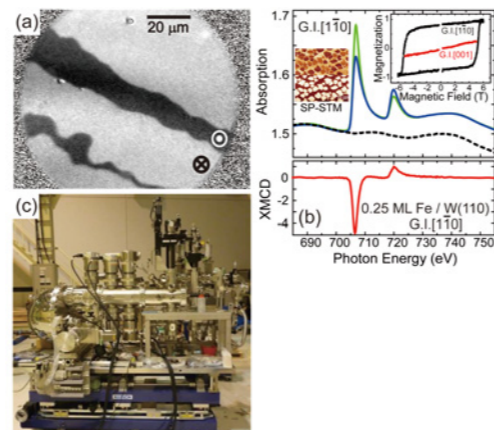
参考文献

- 1) "Molecular Orientation and Electronic States of Vanadyl-phthalocyanine on Si(111) and Ag(111) Surfaces" K. Eguchi, Y. Takagi, T. Nakagawa and T. Yokoyama, *J. Phys. Chem. C* **117**, 22843 (2013).
- 2) "Anisotropic Thermal Expansion and Cooperative Invar/Anti-Invar Effects in Mn Alloys" T. Yokoyama and K. Eguchi, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 075901 (2013).
- 3) "Anharmonicity and Quantum Effects in Thermal Expansion of an Invar Alloy" T. Yokoyama and K. Eguchi, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 065901 (2011).
- 4) "Measurements of threshold photoemission magnetic dichroism using ultraviolet lasers and a photoelastic modulator" T. Nakagawa, T. Yokoyama, M. Hosaka and M. Katoh, *Rev. Sci. Instrum.* **78**, 023907 (2007).
- 5) "Magnetic circular dichroism near the Fermi level" T. Nakagawa and T. Yokoyama, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 237402 (2006).

を評価・解析には空間分解能と時間分解能の両方を備えた本手法が有効に利用できると期待されます。

一方、燃料電池などの実材料をその動作下で評価・解析する手法として、雰囲気制御硬X線光電子分光装置を開発しました。光電子分光法は、通常は超高真空下での測定が必須ですが、最近100Pa程度まで動作可能な軟X線(X線エネルギー~1000eV)光電子分光法が開発されました。我々は硬X線(X線エネルギー~8000eV)を用いることで、3000Paまでの測定が可能な光電子分光装置の開発に成功し、固体高分子形燃料電池動作下(湿った雰囲気)での光電子スペクトルを得ることができました。

また、分子放射光施設UVSOR-IIIにおいては、超高真空仕様超伝導磁石極低温クライオスタットを用いた表面・薄膜磁性評価用X線磁気円二色性装置を共同利用に供し、国内外からの多くの利用者の方々が成果を挙げています。さらに、100psほどの時間分解能を有する硬X線吸収分光の開発を始め、新奇材料・素子の時空間分解分光計測による新しい解析を目指しています。



(a) 紫外磁気円二色性光電子顕微鏡で観測したNi薄膜の磁区構造。暗部が上向き、明部が下向きの磁区に対応。(b) UVSORで測定された単層Feナノ粒子のX線磁気円二色性スペクトル。巨大な保磁力を有することその原因が明らかとなりました。(c) SPring-8に設置された雰囲気制御硬X線光電子分光装置。



中村 敏和(准教授)

1987年京都大学理学部卒業、1992年同大学院理学研究科博士課程修了、理学博士。学習院大学理学部助手を経て1998年6月より現職。
TEL: 0564-55-7381
FAX: 0564-54-2254
mail: t-nk@ims.ac.jp

■電子物性研究部門

分子性固体の磁気共鳴研究

私たちのグループでは、電子スピン共鳴(ESR)や核磁気共鳴(NMR)を主たる実験手法として分子性物質の研究を行っています。物質の示す性質の起源に迫る物性物理分野の基礎研究を行うとともに、新しい分子性物質の機能性を物質分子科学の観点から探索しています。磁気共鳴は、物質中の電子スピンや核スピンを探針(プローブ)として物質の電子状態や構造情報を得る分光計測手法です。私たちは独自に改良した固体幅広核磁気共鳴装置や、分子研が世界に誇るパルス・強磁場を用いた最先端の電子スピン共鳴装置を利用し、研究を行っています。

プラスチックは絶縁体の代表格ですが、電気化学酸化等を行うことで電気を流すようになります。分子性物質が電気を流すことが知られてから半世紀以上経ち、超伝導体も発見されていますが、まだ未解決な問題が多く残っています。このような物質群は分子性導体や有機導体と呼ばれ、現在も国内外の研究者によって盛んに研究が行われています。これらの分子性導体のもっとも顕著な特性として、多様な基底状態(極低温における電子状態)を取ることがあげられます。異なるサイズのイオンにより単位格子の大きさを変えたり、あるいは物理圧力をわずかに加えるだけで、金属、絶縁体、強誘電、反強磁性、超伝導といった種々の物性を示します。

参考文献

- 1) S. Jin, X. Ding, X. Feng, M. Supur, K. Furukawa, S. Takahashi, M. Addicoat, M. E. El-Khouly, T. Nakamura, S. Irlle, S. Fukuzumi, A. Nagai, and D. Jiang, "Charge Dynamics in A Donor-Acceptor Covalent Organic Framework with Periodically Ordered Bicontinuous Heterojunctions," *Angew. Chem., Int. Ed.* **52** (2013) 2017-2021.
- 2) T. Naito, T. Karasudani, K. Ohara, T. Takano, Y. Takahashi, T. Inabe, K. Furukawa, and T. Nakamura, "Simultaneous Control of Carriers and Localized Spins with Light in Organic Materials," *Adv. Mater.* **24** (2012) 6153-6157.
- 3) K. Furukawa, T. Hara and T. Nakamura, "Spin-Dynamics in Vicinity of Spin-Gap Phase Transition for Organic Conductor (TMTTF)₂X," *J. Phys. Soc. Jpn.* **79** (2010) 043702 (4 pages).
- 4) F. Iwase, K. Sugiura, K. Furukawa and T. Nakamura, "¹³C NMR study of the magnetic properties of the quasi-one-dimensional conductor (TMTTF)₂SbF₆," *Phys. Rev. B* **84** (2011) 115140 (7 pages).
- 5) F. Iwase, K. Sugiura, K. Furukawa and T. Nakamura, "The ground states and critical behavior in the quasi-one-dimensional

これら分子性導体の電子状態を調べることは、物性物理が直面している諸問題の根元的理解につながります。私たちは分子性導体の示すこのような特異な電子状態に関心を持ち、研究を行っています。

太陽電池の材料となる機能性物質に対して、光誘起で電気伝導性を示す物質の電荷分離過程を、時間分解した電子スピン共鳴測定により、時々刻々と変化するスピン分布の時間過程を波動関数レベルでの明らかにしています。^{1,2)} この他、強磁場の電子スピン共鳴法を用いることで、全く新しいタイプの分子性導体に関しミクロなレベルでスピン状態や電子状態を調べたり、パルス法を用いて基底状態相転移近傍のスピン動的挙動を調べ電子相の発現機構を明らかにしています。以上のように、最先端の電子スピン共鳴法を駆使して研究を行っています。³⁾

また、核磁気共鳴法に関しても、超高圧力下でも観測できる装置を用いたり、実効的に圧力を加えることが出来る混晶体に対する研究を行うことで、上述の多彩な電子状態を示す分子性導体の電子相起源解明研究を行ってきました。⁴⁻⁶⁾

このように磁気共鳴法を駆使することにより、我々は分子性導体における多種多様な物性起源の理解を目指すとともに、最近では先端電子スピン共鳴装置による生体関連試料の構造計測も行っています。

- complexes (TMTTF)₂[(AsF₆)_x(SbF₆)_{1-x}]," *Phys. Rev. B* **81** (2010) 245126 (6pages).
- 6) K. Furukawa, K. Sugiura, F. Iwase and T. Nakamura, "Structural Investigation of the Spin-singlet Phase in (TMTTF)₂," *Phys. Rev. B* **83** (2011) 184419 (5 pages).



多周波パルス時間分解ESR分光器

〈キーワード〉

- 電子スピン共鳴
- 核磁気共鳴
- 有機導体

〈キーワード〉

- 表面薄膜磁性
- 分子磁性
- 磁気顕微鏡
- 表面分光

■分子機能研究部門
有機薄膜太陽電池



平本 昌宏(教授)

1984年大阪大学大学院基礎工学研究科化学系博士課程中退、84年分子科学研究所文部技官、88年大阪大学工学部助手、97年大阪大学大学院工学研究科准教授を経て、2008年より現職。専門：有機半導体の光電物性と太陽電池、デバイス応用。
TEL: 0564-59-5537
mail: hiramoto@ims.ac.jp

エネルギー問題の解決は科学者の責務です。特に、我が国において、エネルギー資源がない状況は、明治維新から現在に至るまで全く変わっておらず、先の大戦、本年の原子力災害のような、悲劇的で大きな歴史の転換は、常にエネルギーをめぐる起こっています。太陽電池は我が国のエネルギー自給の切り札となります。また、「エネルギーを制するものは世界を制する」との言葉にあるように、石油に代わって、21世紀の世界の基幹産業になります。

以上の考えに基づき、平本グループでは、次世代太陽電池の有力候補である、有機薄膜太陽電池の研究を行っています。

有機薄膜太陽電池は、軽量のフレキシブルシートで、印刷によって新聞のように大量安価に作れ、屋根、壁、窓に貼り付けたり、自動車にペンキのように塗って使うなど、これまでの無機系太陽電池とはちがった全く新しい使い方になります。

平本は、1991年に、有機混合接合(有機版p-i-n接合、バルクヘテロ接合ともよばれる)(図1)のコンセプト^{1,2)}を世界に先がけて提案し、現在の有機薄膜太陽電池はこの構造をつかっています。また、1990年に、有機タンデム接合を世界で初めて提案し、³⁾最近の最高変換効率の多くは有機タンデム接合セルによるものです。

有機薄膜太陽電池の分野でブレイクスルーを起こすには、有機半導体の物性物理学、すなわち、イレブンナイン超高純度化、ドーピングによるpn制御、内蔵電界形成、オーミック接合形成、半導体パラメータ精密評価、等を、シリコン無機半導体のレベルまで引き上げる必要があります。また、有機混合接合層のナノ構造設計・製作技術の開発も不可欠です。これらの有機半導体基礎研究とデバイス応用をリンクさせ、数年以内に実用化に充分な、シングルセルで効率15%の有機太陽電池を実現することを目指しています。

平本グループでは、以上の考えに基づいて研究し、フラレーン(C₆₀)を単結晶として取り出してセブナイン(7N, 99.99999%)以上に超高純度化する技術を開発して(図2)、有機薄膜太陽電池のp-i-nバルクヘテロ接合セル(図3)に組み込み、5.3%の最高効率を観測しています。⁴⁾

また、セブナインC₆₀にモリブデン酸化物(MoO₃)をドーピングすることによって、これまでn型性しか示さなかったC₆₀のp型化、⁵⁾pnホモ接合作製に初めて成功しました。この成果は、有機太陽電池もシリコン太陽電池のように、ドーピングによってエネルギー構造を設計したセルの製造ができることに基礎科学的な根拠を与えるものです。

参考文献

- 1) M. Hiramoto, H. Fujiwara, M. Yokoyama, "Three-layered organic solar cell with a photoactive interlayer of codeposited pigments", *Appl. Phys. Lett.*, **58**, 1062-1064 (1991).
- 2) M. Hiramoto, H. Fujiwara, M. Yokoyama, "p-i-n like behavior in three-layered organic solar cells having a co-deposited interlayer of pigments", *J. Appl. Phys.*, **72**, 3781-3787 (1992).
- 3) M. Hiramoto, M. Suezaki, M. Yokoyama, "Effect of thin gold interstitial-layer on the photovoltaic properties of tandem organic solar cell", *Chem. Lett.*, **1990**, 327-330 (1990).
- 4) M. Hiramoto, "Efficient organic p-i-n solar cells having very thick codeposited i-layer composed of highly purified organic semiconductors", in *Proc. SPIE*, Vol. 7052, Organic Photovoltaics IX, 70520H-1-6 (2008).
- 5) M. Kubo, T. Kaji, K. Iketaki, M. Hiramoto, "Conduction Type Control of Fullerene Films From n- to p-Type by Molybdenum Oxide Doping", *Appl. Phys. Lett.*, **98**, 073311 (2011).

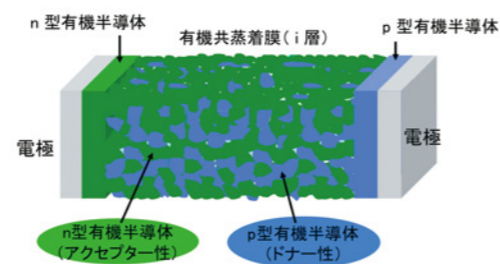


図1: p-i-nバルクヘテロ接合(有機混合接合)の概念

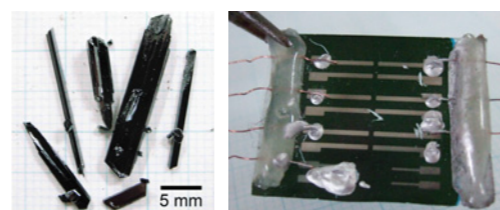
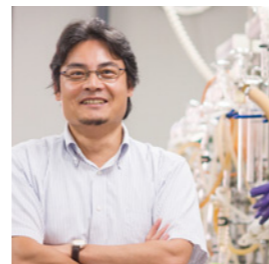


図2: セブナイン(7N, 99.99999%)C₆₀単結晶
図3: 5.3%最高効率p-i-nセルの写真

■分子機能研究部門
二次元高分子の創製



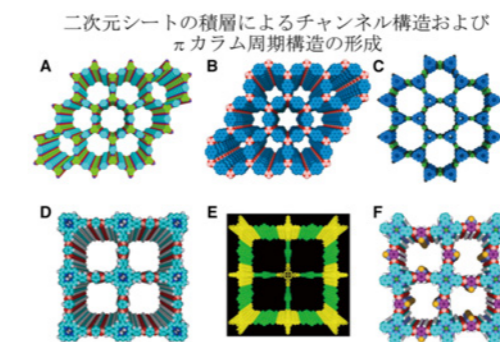
江 東林(准教授)

1998年東京大学大学院工学系研究科博士課程修了、東京大学助教、科学技術振興機構ERATOプロジェクトグループリーダーを経て、2005年5月より現職。2005年10月～2009年3月、2009年10月～2013年3月、JSTさきがけ研究者兼任。
TEL: 0564-55-7351
FAX: 0564-55-2254
mail: jiang@ims.ac.jp

二次元高分子は、規則正しいポア構造を有する平面状高分子で、積層することによって一次元チャンネルを有する共有結合性有機骨格構造(Covalent Organic Frameworks)を形成します。私たちは、世界を先駆けて二次元高分子の分子設計、合成、構造制御及び機能開拓の各側面において、実験研究を展開しています。

私たちは、反応ユニットの立体配置を制御した上で、位相幾何学的手法により結合パターンを規定し、二次元シートの形成・結晶化を通じて多孔性物質を構築できることを見いだしました。本手法を適用することで、有機分子骨格・ポア形状・サイズを設計して構築することを原理的に可能としました。例えば、C2、C3対称性ユニットからは六角形やスター状骨格(図A-C; *Angew. Chem.* 2008, *Angew. Chem.* 2009等)、C4対称性分子からは正方形の分子骨格(図D-F; *Angew. Chem.* 2010, *Chem. Commun.* 2011, *JACS* 2011, *Angew. Chem.* 2012, *JACS* 2013等)を有する共有結合性有機骨格構造を合成・構造決定することに成功してきています。また、チャンネル壁に様々なユニットを固定できる合成手法を開発し、種々の共有結合性有機骨格構造に幅広く適用できることを見いだしています(*Nat. Commun.* 2011)。この手法は、分子骨格を保ったままポアサイズをメソからマイクロまで精密制御することができ、ポア機能の高度化・デザインを可能としました。

これらに加え、二次元高分子の物理的・化学的性質の解明及び機能開拓にも着手しています。ホール輸送(*Angew. Chem.* 2011)、電子伝達



二次元高分子は周期的なπカラム構造と一次元ナノチャンネル構造を作り出すことができる

(*JACS* 2011)、p型とn型を兼ね備えるアンバイポーラ(ambipolar)伝導(*Adv. Mater.* 2012)、光伝導(*Angew. Chem.* 2010, *JACS* 2011, *Angew. Chem.* 2012)、光誘起電子移動・電荷分離(*Angew. Chem.* 2013)、二酸化炭素吸蔵(*Nat. Commun.* 2011)などの機能を明らかにしています。

参考文献

- 1) A Belt-Shaped, Blue Luminescent and Semiconducting Covalent Organic Framework Shun Wan, Jia Guo, Jangbae Kim, Hyotcherl Ihee, Donglin Jiang* *Angew. Chem. Int. Ed.* **47**, 8826-8830 (2008) (VIP, Selected as a frontispiece of *ACIE*, and Highlighted by *C&EN*).
- 2) A Photoconductive Covalent Organic Framework: Self-Condensed Arene Cubes with Eclipsed 2D Polypyrrene Sheets for Photocurrent Generation Shun Wan, Jia Guo, Jangbae Kim, Hyotcherl Ihee, Donglin Jiang* *Angew. Chem. Int. Ed.* **48**, 5439-5442 (2009).
- 3) Noncovalently Netted, Photoconductive Sheets with Extremely High Carrier Mobility and Conduction Anisotropy from Triphenylene-Fused Metal Trigon Conjugates Long Chen, Jangbae Kim, Tomoya Ishizuka, Yoshihito Honsho, Akinori Saeki, Shu Seki, Hyotcherl Ihee, and Donglin Jiang* *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 7287-7292 (2009).
- 4) Light-Harvesting Conjugated Microporous Polymers: Rapid and Highly Efficient Flow of Light Energy with a Porous Polyphenylene Framework as Antennae Long Chen, Yoshihito Honsho, Shu Seki and Donglin Jiang* *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 6624-6628 (2010) (Cover Page).
- 5) CMPs as Scaffolds for Constructing Porous Catalytic Frameworks: A Built-In Heterogeneous Catalyst with High Activity and Selectivity Based on Nanoporous Metalloporphyrin Polymers Long Chen, Yong Yang and Donglin Jiang* *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 9138-9143 (2010).
- 6) Synthesis of Metallophthalocyanine Covalent Organic Frameworks That Exhibit High Carrier Mobility and Photoconductivity Xuesong Ding, Jia Guo, Xiao Feng, Yoshihito Honsho, Jingdong Guo, Shu Seki, Phornphimon Maitarad, Akinori Saeki, Shigeru Nagase and Donglin Jiang* *Angew. Chem., Int. Ed.* **50**, 1289-1293 (2011).
- 7) Covalent Organic Frameworks Xiao Feng, Xuesong Ding, and Donglin Jiang* *Chem. Soc. Rev.* **41**, 6010-6022 (2012).
- 8) Charge Dynamics in a Donor-Acceptor Covalent Organic Framework with Periodically Ordered Bicontinuous Heterojunctions, Shangbin Jin, Xuesong Ding, Xiao Feng, Mustafa Supur, Ko Furukawa, Seiya Takahashi, Matthew Addicoat, Mohamed E. El-Khouly, Toshikazu Nakamura, Stephan Irle, Shunichi Fukuzumi, Atsushi Nagai, and Donglin Jiang*, *Angew. Chem., Int. Ed.* **52**, 2017-2021 (2013) (Inside Cover).

〈キーワード〉

二次元高分子
●
多孔性
●
ガス貯蔵
●
機能性材料

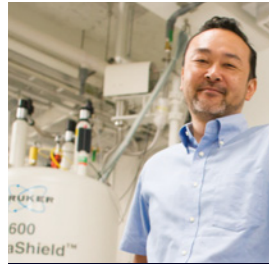
〈キーワード〉

有機薄膜太陽電池
●
有機半導体
●
p-i-n接合
●
セブナイン超高純度化
●
pn制御
●
ナノ構造設計
●
有機半導体物性物理学



■分子機能研究部門

生体分子の構造・物性解析のための固体核磁気共鳴法の開発



西村 勝之(准教授)

1993年兵庫県立姫路工業
大学理学部(現・兵庫県立大学)
卒業、1999年同大学大学院
理学研究科博士課程終了・理学
博士。米国立高磁場研究所、
フロリダ州立大学博士研究員、
横浜国立大学工学研究院助手
を経て、2006年4月より現職。
TEL: 0564-55-7415
FAX: 0564-55-7415
mail: nishimur@ims.ac.jp

核磁気共鳴法(NMR)は原子核の持つ磁気モーメントが磁場中で小さい磁石として振舞う性質を利用して、測定対象にラジオ波領域の電磁波を照射することにより非破壊で物質内部の分子の詳細な構造や運動性に関する原子分解能での情報を得ることができます。固体NMRは物理学者によってその基礎が築かれ、物理化学者によって化学的情報を得る手段として方法論が発展してきました。固体NMRは結晶や液晶から、粉末のようなアモルファス試料や粘性の高い液状試料まで非常に多様な物質に対して適用可能であり、特に生体分子への適用が注目されています。

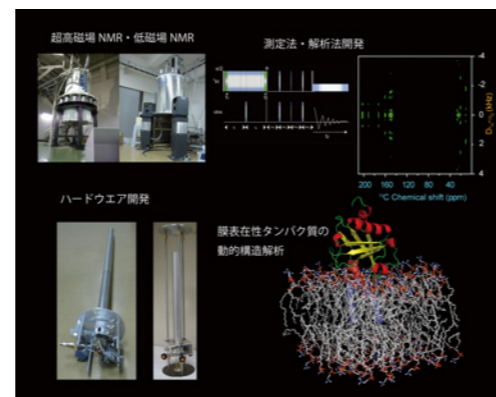
当研究グループでは分子に関する様々な情報を得るための新規固体NMR測定法の開発を行っています。NMRで観測する内部相互作用には、静磁場に対する分子の相対角度を変化させる空間項の変調および、特定の強度、時間間隔でのラジオ波照射により核スピニング角運動量への外部摂動を与えることが可能です。そのため、これらの外部摂動を適切に組み合わせる実験をデザインして特定の内部相互作用を選択的に消去、復活させることが可能です。それら内部相互作用の精密な観測、解析により原子間距離や角度情報等の分子の幾何情報を得ることが出来ます。さらに緩和時間やスペクトル線形解析から特定の時間領域の分子運動性を同定することが可能です。

参考文献

- 1) K. Nishimura, S. Kim, L. Zhang, T. A. Cross, *Biochemistry*, **41**, (2002)13170-13177.
- 2) J. Hu, R. Fu, K. Nishimura, L. Zhang, H.X Zhou, D. D. Busath, V. Vijayvergiya, T. A. Cross, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **103** (2006) 6865-6870.
- 3) N. Uekama, T. Aoki, T. Maruoka, S. Kurisu, A. Hatakeyama, S. Yamaguchi, M. Okada, H. Yagisawa, K. Nishimura*, S. Tuzi*, *Biochim. Biophys. Acta*, **1788** (2009) 2575-2583.
- 4) M. Tanio, K. Nishimura*, *Anal. Biochem.* **431**,106-114 (2012).
- 5) M. Tanio, K. Nishimura*, *Biochim. Biophys. Acta*, 1834 (2013)1034-1043.
- 6) K. Nishimura*, A. Naito."REDOR in Multiple Spin System", *Modern Magnetic Resonance*, Springer, The Netherlands (2006).
- 7) K. Nishimura*, A. Naito, *Chem. Phys. Lett.* **380**,569-576 (2003).
- 8) K. Nishimura*, A. Naito, *Chem. Phys. Lett.* **402**,245-250 (2005).
- 9) K. Nishimura*, A. Naito, *Chem. Phys. Lett.* **419**, 120-124 (2006).
- 10) T. Iijima, K. Nishimura*, *Chem. Phys. Lett.* **514**, 181-186 (2011).

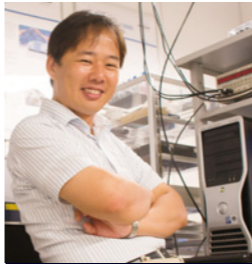
目的の相互作用を観測するための最適な方法はその試料の物性で大きく変化するため目的に適した測定法の開発が重要です。特に我々が測定対象としている生体分子は水分を多く含み、極めて運動性の高い状態でその機能を発揮します。膜タンパク質を例にとると、十分に水和された脂質膜を含めた試料を調製し、活性条件に近い状態での固体NMRを用いた解析が必要になります。そのため格子を持つような硬い固体材料と異なり、局所的な分子運動を考慮し、誤差が生じないような測定法の開発、適用および解析が必要になります。これまで膜タンパク質など脂質と相互作用する生体分子の立体構造解析¹⁻⁵⁾ および、その解析に有効な解析法、さらに原子間距離測定法の原理的な問題の解析⁶⁾ 低試料発熱型測定法の感度向上法⁷⁾ および角度測定法開発^{8,9)} を行ってきました。現在は特に脂質膜上で特定の脂質分子と結合することによって機能を発現する膜表面タンパク質をモデルタンパク質³⁻⁵⁾ として用いて、それに必要な測定法開発およびハードウェア開発を行っています。

また、生体分子以外にも分子材料の解析に適用可能な測定法の開発なども行っています。¹⁰⁾ 今後、これから生体分子のみならず多様な分子に適用可能な構造、運動性解析手法のスタンダードとなるような新規固体NMR測定法の開発を目指しています。



現在行っている研究の構成要素

生命・錯体分子 科学研究領域



古谷 祐詞(准教授)

1999年京都大学理学部卒業、
2001年同大学大学院理学
研究科修士、2004年博士課程
修了、博士(理学)。2003～
2005年学術振興会特別研究
員、2006～2008年名古屋工業
大学大学院工学研究科助手、
助教を経て、2009年3月より
現職。
TEL: 0564-55-7330
mail: furutani@ims.ac.jp

■生体分子情報研究部門

赤外差スペクトル法による膜タンパク質の機能発現機構の研究

界面を隔てた情報伝達と 物質輸送を実現する膜タンパク質

細胞膜には、外界からの刺激に応答するためのセルセンサーや恒常性維持に重要なチャンネル、トランスポーター等の膜タンパク質が存在します。これらは外界からの情報や物質を細胞内に伝達したり、異物を細胞外に排除したり、膜電位やプロトン濃度勾配を形成し、ATPなどのエネルギー物質を生産したりするなど、細胞の生存に欠かせない精巧な分子機械としてはたらいています。

このような膜タンパク質が機能発現する分子メカニズムの解明には、基質や補酵素となるイオンや分子との相互作用に関する原子レベルでの構造情報が必要です。一般的に膜貫通タンパク質の構造解析は難しく、Protein Data Bankへの登録率は約2%にすぎません。また、得られた構造についても水素原子が見えないため、イオンの配位構造や分子内、分子間水素結合構造などの情報が不足しています。このような機能発現に重要な役割を果たす部分構造を、赤外差スペクトル法を活用することで明らかにし、膜貫通タンパク質の機能発現機構に迫ることを目的に研究を進めています。

参考文献

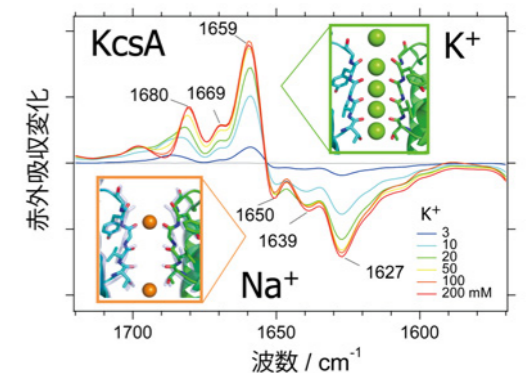
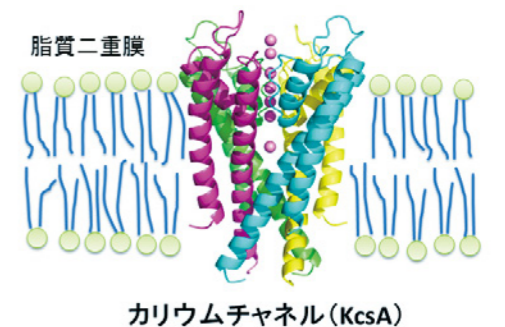
- 1) Y. Furutani, M. Shibata and H. Kandori, "Strongly Hydrogen-Bonded Water Molecules in the Schiff Base Region of Rhodopsins", *Photochem. Photobiol. Sci.* **4**, 661-6 (2005).
- 2) Y. Sudo, Y. Furutani, J. L. Spudich and H. Kandori, "Early Photocycle Structural Changes in a Bacteriorhodopsin Mutant Engineered to Transmit Photosensory Signals", *J. Biol. Chem.* **282**, 15550-8 (2007).
- 3) Y. Kitade, Y. Furutani, N. Kamo and H. Kandori, "Proton Release Group of *pharaonis* Phoborhodopsin Revealed by ATR-FTIR Spectroscopy", *Biochemistry* **48**,1596-1603 (2009).
- 4) Y. Furutani, H. Shimizu, Y. Asai, T. Fukuda, S. Oiki and H. Kandori, "ATR-FTIR Spectroscopy Revealed the Different Vibrational Modes of the Selectivity Filter Interacting with K⁺ and Na⁺ in the Open and Collapsed Conformations of the KcsA Potassium Channel", *J. Phys. Chem. Lett.* **3**, 3806-10 (2012).
- 5) Y. Furutani, T. Murata and H. Kandori, "Sodium or Lithium Ion-Binding-Induced Structural Changes in the K-ring of V-ATPase from *Enterococcus hirae* Revealed by ATR-FTIR Spectroscopy", *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 2860-3 (2011).

(上)カリウムチャンネルKcsAの結晶構造

(下)赤外差スペクトル法で明らかとなったKcsAのイオン選択フィルター部位のK⁺およびNa⁺イオンとの相互作用変化

イオン結合に伴う 赤外差スペクトルの計測

赤外差スペクトル法はロドプシンや光合成タンパク質などの光受容タンパク質では盛んに研究が行われ、その分子メカニズムの解明に大いに役立てられています。これまで古細菌型ロドプシンに対する研究を行い、光駆動プロトンポンプに重要な役割を果たす強い水素結合を形成した水分子を見いだしたり¹⁾ 光センサー機能のスイッチとしてはたらくレチナールースレオニン残基間の相互作用変化を明らかにしたりしました。²⁾ また、全反射赤外分光法により、光ではなく、イオン結合による赤外差スペクトルを計測し、ロドプシンの塩化物イオン取込み機構を明らかにしました。³⁾ この手法は、KcsAなどのイオンチャンネル⁴⁾ V型ATPase⁵⁾ などのトランスポーターにも適用できる手法です。さらに、ストップフロー法を活用することでミリ秒程度の時間分解計測を目指し、X線結晶構造からは見えてこない膜タンパク質のダイナミックな分子実態に迫りたいと考えています。



<キーワード>

固体NMR

膜タンパク質

脂質

測定法開発

ハードウェア開発

<キーワード>

赤外分光法

膜タンパク質

イオンチャンネル

トランスポーター



魚住 泰広(教授)

1984年北海道大学薬学部卒、1990年薬学博士。日本学術振興会特別研究員、北海道大学教務職員、同助手、米国コロンビア大学研究員、京都大学講師、名古屋市立大学教授を経て2000年より現職。理化学研究所研究チームリーダー。
TEL: 0564-59-5571
FAX: 0564-59-5574
mail: uo@ims.ac.jp

<キーワード>

- 遷移金属触媒
- 疎水性相互作用
- 触媒的不斉合成
- 固定化触媒

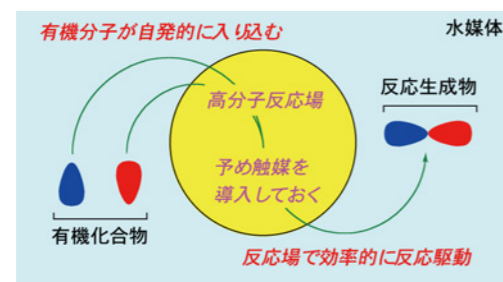
■錯体触媒研究部門

有機分子変換を駆動・制御する新しい反応システムの構築

人類が化学を体系づける遥か太古の昔から生命は精緻な化学分子変換を実現しています。それら生命化学反応は中性、常圧、常温、水中で高い選択性を伴って進行します。我々は理想的な化学反応システムの創出を目指し、生命化学工程を司る酵素の構造的模倣ではなく、化学反応の駆動原理、駆動システムを生命から学びとることを出発点としました。すなわち酵素はしばしば遷移金属活性中心を持ち、タンパクからなる疎水性ポケットの中で化学反応を駆動します。そこで我々は両親媒性高分子や両親媒性分子集合体が水中でこそ創りだす疎水性反応場を利用し、そこに遷移金属触媒(錯体触媒やナノ粒子触媒)を埋め込むことで完全水系媒体中での精密な有機分子変換工程を達成しています。中でも高分子マトリクス内への固定化と水中での触媒反応実施を前提に設計された独自の光学活性配位子-パラジウム錯体を導入した両親媒性高分子触媒は、アリル置換反応やSuzuki反応において高い選択性を水中不均一条件下で実現しています。また高分子固定化白金ナノ触媒ではアルコール類の酸化反応が触媒的に水中で酸素ガスのみで実現されます。

有機分子は元来「油」であり水には馴染みません。水中で高分子触媒を用いて有機化学反応を実施すると、疎水性有機分子は自ずから高分子マトリクス内に入り込んで行き高濃度状態で触媒の近傍に集まり、高効率で触媒反応が駆動されます。すなわち外部からのエネルギーなどに依らず、分子が持つ性質そのものを駆動力とする反応システムです。

我々は錯体触媒の精緻な分子設計に加えて、触媒を膜状にマイクロ流路反応装置内に発生させる新技術や、疎水性反応場を分子の自己集積によって

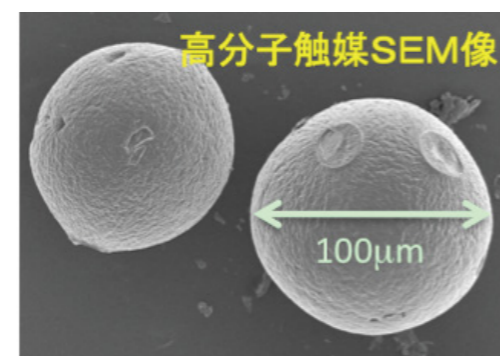


疎水性相互作用による反応駆動原理

反応系内で自発的に発生させる仕組みの創出など、反応システム全体の設計と構築による21世紀の有機化学反応のパラダイムシフトを目指します。

参考文献

- 1) Yoichi M. A. Yamada, Shaheen M. Sarkar, Yasuhiro Uozumi Amphiphilic Self-Assembled Polymeric Copper Catalyst to Parts per Million Levels: Click Chemistry *J. Am. Chem. Soc.*, 2012, **134**, 9285-9290.
- 2) Yoichi M. A. Yamada, Shaheen M. Sarkar, Yasuhiro Uozumi Self-Assembled Poly(imidazole-palladium): Highly Active, Reusable Catalyst at Parts per Million to Parts per Billion Levels *J. Am. Chem. Soc.*, 2012, **134**, 3190-3198.
- 3) Shaheen M. Sarkar, Yoichi M. A. Yamada, Yasuhiro Uozumi A highly Active and Reusable Self-Assembled Poly (Imidazole/Palladium) Catalyst: Allylic Arylation/Alkenylation *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, **50**, 9437-9441.
- 4) Go Hamasaka, Tsubasa Muto, Yasuhiro Uozumi Molecular-Architecture-Based Administration of Catalysis in Water: Self-Assembly of an Amphiphilic Palladium Pincer Complex *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, **50**, 4876-4878.
- 5) Yasuhiro Uozumi, Yutaka Matsuura, Takayasu Arakawa, Yoichi M. A. Yamada Asymmetric Suzuki-Miyaura Coupling in Water with a Chiral Palladium Catalyst Supported on an Amphiphilic Resin *Angew. Chem. Int. Ed.* 2009, **48**, 2708-2710.
- 6) Yoichi M. A. Yamada, Takayasu Arakawa, Heiko Hocke, Yasuhiro Uozumi A Nanoplatinum Catalyst for Aerobic Oxidation of Alcohols in Water *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007, **46**, 704-706.
- 7) Yasuhiro Uozumi, Yoichi M. A. Yamada, Tomohiko Beppu, Naoshi Fukuyama, Masaharu Ueno and Takehiko Kitamori Instantaneous Carbon-Carbon Bond Formation Using a Microchannel Reactor with a Catalytic Membrane *J. Am. Chem. Soc.* 2006, **128**, 15994-15995.
- 8) Kazuhiro Takenaka, Maki Minakawa and Yasuhiro Uozumi NCN Pincer Palladium Complexes: Their Preparation via a Ligand Introduction Route and Their Catalytic Properties *J. Am. Chem. Soc.* 2005, **127**, 12273-12281.



反応駆動の「場」を提供する高分子



正岡 重行(准教授)

1999年同志社大学工学部卒、2004年京都大学大学院工学研究科博士課程修了、工学博士。リバプール大学博士研究員、九州大学助手/助教を経て2011年2月より現職。2009年10月より、科学技術振興機構さきがけ「光エネルギーと物質変換」研究員(併任)。
TEL: 0564-59-5587
FAX: 0564-59-5589
mail: masaoka@ims.ac.jp

<キーワード>

- 金属錯体
- 人工光合成
- 触媒
- 酸素発生反応

■錯体物性研究部門

人工光合成システムの構築を志向した金属錯体化学

太陽光エネルギーを利用して、水素やアルコールなどの貯蔵可能なクリーン燃料を作り出す。“人工光合成”と呼ばれるこれらの反応は、実用化されれば世界のエネルギー問題が一気に解決する可能性のある究極のエネルギー製造技術と考えられています。我々の研究グループでは、生体機能の中心的な役割を果たしている“金属錯体”に注目し、人工光合成を実現するための基盤づくりに取り組んでいます。

植物が行う光合成では、二酸化炭素(CO₂)が還元され炭水化物が合成されるのと同時に、水(H₂O)を酸化して酸素(O₂)が作られています。特に、後者の酸素発生反応は、天然の光合成だけでなく人工光合成システムの構築においても不可欠なプロセスであり、高い活性・耐久性を有する酸素発生触媒の開発が人工光合成を達成するための急務の課題となっています。

最近、我々の研究グループでは、アクア配位子(H₂O)を1つだけでもルテニウム単核錯体が、酸素発生触媒として特異的に高活性であることを見出しました。従来、単核ではなく二核以上の多核錯体が酸素発生触媒として格段に効果的であると指摘されてきたため、本研究成果は大きな驚きをもって迎えられました。触媒回転数や酸化剤変換効率も従来の錯体触媒に比べて極めて高く、酸素発生

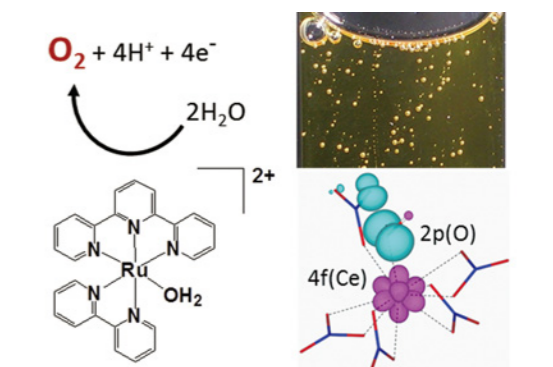
参考文献

- 1) M. Okamura, M. Yoshida, R. Kuga, K. Sakai, M. Kondo, S. Masaoka, "A Mononuclear Ruthenium Complex Showing Multiple Proton-Coupled Electron Transfer toward Multi-electron Transfer Reactions" *Dalton Trans.*, 2012, **41**, 13081.
- 2) M. Kobayashi, S. Masaoka, K. Sakai, "Photoinduced Hydrogen Evolution from Water Based on a Z-Scheme Photosynthesis by a Simple Platinum(II) Terpyridine Derivative" *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2012, **51**, 7431.
- 3) A. Kimoto, K. Yamauchi, M. Yoshida, S. Masaoka, K. Sakai, "Kinetics and DFT Studies on Water Oxidation by Ce⁴⁺ Catalyzed by [Ru(terpy)(bpy)(OH₂)]²⁺" *Chem. Commun.*, 2012, **48**, 239.
- 4) K. Kuroiwa, M. Yoshida, S. Masaoka, K. Kaneko, K. Sakai, N. Kimizuka, "Self-assembly of Tubular Microstructures from Mixed-valence Metal Complexes and their Reversible Transformation via External Stimuli" *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2012, **51**, 656.

反応後も錯体触媒がほとんど分解していないことが分かりました。

合成化学的および物理化学的な実験手法を駆使することにより、詳細な触媒反応機構についても明らかにしています。反応速度論解析の結果、これまでに二核錯体に対して考えられてきた反応機構とは異なり、系中に酸化剤として共存しているセリウム(IV)イオン((NH₄)₂[Ce^{IV}(NO₃)₆])が関与した機構で酸素発生反応が進行していると示唆されました。更に、DFT計算による考察から、セリウム(IV)に配位したヒドロキソ配位子(OH⁻)はラジカル性を帯びているという結果が得られました。このことは、高原子価ルテニウム錯体オキソ種とセリウム(IV)に配位したOH⁻との非対称ラジカルカップリングによりO-O結合が生成することを示唆しています。Ceが酸化剤として特殊な反応を誘発することは知られていたが、本研究はその本質に迫った初めての例と言えます。

我々の研究グループでは、上記の酸化側の研究に加え、貯蔵可能エネルギーを作り出すための還元側の研究にも精力的に取り組んでいます。最近では、水溶液中、高い水素発生触媒能を有する鉄錯体触媒の開発にも成功しています。現在も、金属錯体を基盤材料とする人工光合成システムの開発を目指し、日夜研究を続けています。



活性が見いだされた触媒分子の構造(左)、酸素ガスが発生している様子(右上)、および反応に重要な役割を果たすセリウム錯体のスピン密度分布(右下)

■生体分子機能研究部門

新規な機能を有する金属タンパク質の構造と機能



青野 重利 (教授)

1982年東京工業大学工学部卒、1987年同大学大学院理工学研究科博士課程修了、工学博士。日本学術振興会特別研究員、ジョージア大学博士研究員、東京工業大学助手、北陸先端科学技術大学院大学助教授を経て2002年5月より現職。

TEL: 0564-59-5575

FAX: 0564-59-5576

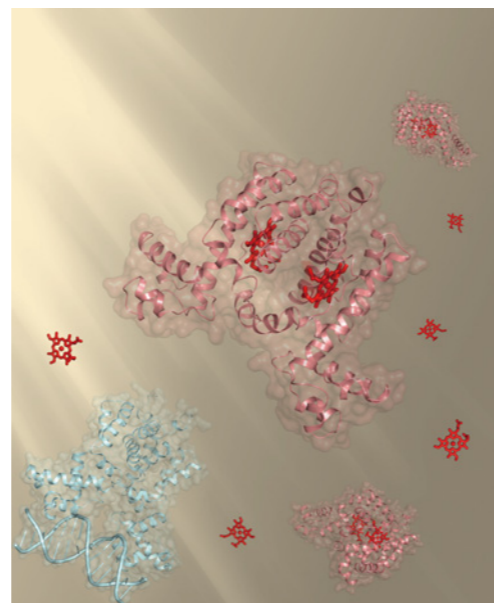
mail: aono@ims.ac.jp

生体中には遷移金属イオンを含む金属タンパク質が数多く含まれています。ゲノム解析等の結果によれば、生体中に含まれるタンパク質の3分の1以上は金属タンパク質であるとも推定されています。これらの金属タンパク質は、エネルギー代謝、物質代謝、シグナル伝達など、様々な生理機能の発現・制御に深く関与しています。

金属タンパク質の活性中心は、単純な単核金属イオンではなく、無機化学および錯体化学的観点からみても特異な構造を有している場合も多くみられます。このような特徴的な構造を有した遷移金属含有活性中心は、構造的に特異な性質を示すのみならず、機能的にも特異な性質を示し、生物無機化学の研究対象として非常に興味深いものです。我々の研究グループでは、このような金属タンパク質の中でも特に、これまでにない新規な機能を有する金属タンパク質として、酸素や一酸化炭素といった気体分子のセンサーとして機能する一連のセンサータンパク質を対象として研究を進めています。

気体分子が生理的エフェクター分子として機能し、さまざまな生理機能制御に関与していることは、気体分子が示す新規な生理機能として大きな注目を集めています。気体分子が生理的エフェクターとして機能するためには、気体分子のセンサータン

パク質の存在が必要不可欠であるが、気体分子センサータンパク質の研究は国際的にみても、最近始まったばかりです。当研究室では、酸素、一酸化窒素、一酸化炭素などの気体分子が生理的エフェクターとして機能する遺伝子発現制御系、走化性制御系、セカンドメッセンジャー合成を介した代謝制御系などを対象とし、気体分子によるこれら生理機能制御の分子機構解明を目的として研究を行っています。気体分子により駆動されるシグナル伝達系として捉えることができるこれらの系においては、そのシグナル伝達系の最上流において、気体分子をセンシングするための遷移金属含有型センサータンパク質が重要な役割を果たしています。我々は、分子生物学、遺伝子工学、構造生物学、および各種分光学的な実験手法を駆使することにより、酸素、一酸化窒素、一酸化炭素などのガス分子を選択的にセンシングしている気体分子センサータンパク質による、気体分子の選択的センシングに関する分子機構の解明、および気体分子によるタンパク質機能制御機構の解明を目指した研究を行っています。また、センサータンパク質以外に、これまでに例の無い新規なヘムタンパク質の構造機能相関の解明を目的とした研究にも取り組んでいます。



細胞内ヘム濃度制御に関わるヘムセンサータンパク質HrtRは、ヘムをセンシングすることによりDNAから解離し、ヘム排出トランスポーター発現を誘起する

参考文献

- 1) "Structural basis for the transcriptional regulation of heme homeostasis in *Lactococcus lactis*" H. Sawai*, M. Yamanaka*, H. Sugimoto, Y. Shiro, S. Aono, *J. Biol. Chem.*, **287**, 30755-30768 (2012) (*equal contribution).
- 2) "Structural Basis for Oxygen Sensing and Signal Transduction of the Heme-based Sensor Protein Aer2 from *Pseudomonas aeruginosa*" H. Sawai, H. Sugimoto, Y. Shiro, H. Ishikawa, Y. Mizutani, S. Aono, *Chem. Commun.*, **48**, 6523-6525 (2012).
- 3) "Novel bacterial gas sensor proteins with transition-metal-containing prosthetic groups as active sites" S. Aono, *Antioxid. Redox Signal.*, **16**, 678-686 (2012).
- 4) "X-ray crystal structure of Michaelis complex of aldoxime dehydratase" H. Sawai, H. Sugimoto, Y. Asano, Y. Kato, Y. Shiro, S. Aono, *J. Biol. Chem.*, **284**, 32089-32096 (2009).

〈キーワード〉

金属タンパク質

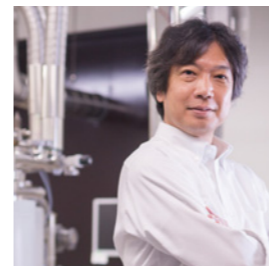
・
センサータンパク質

・
ヘムタンパク質

・
ヘム

■生体分子機能研究部門

生命分子システムの動的秩序形成と高次機能発現の仕組みの探求



加藤 晃一 (教授)

1986年東京大学薬学部卒、1991年同大学院薬学系研究科博士課程修了、薬学博士。東京大学助手・講師、名古屋市立大学大学院薬学系研究科教授を経て2008年4月より現職。

TEL: 0564-59-5225

FAX: 0564-59-5224

mail: kkatonmr@ims.ac.jp

生命現象の特質は、システムを構成する多数の分子素子がダイナミックな離合集散を通じて秩序構造を形成し、外的環境との相互作用を行いつつ、自律的に時間発展していくことにあります。前世紀末期に勃興したオミクスアプローチは生命体を構成する分子素子に関する情報の網羅的集積を実現しました。しかしながら、それらの生命素子が自律的に柔軟かつロバストな高次秩序を形成するメカニズムを理解することは、これからの生命科学の重要な課題です。私たちは、生物学・化学・物理学の分野横断的な研究を通じて、内的複雑性を秘めた生命分子素子が動的な秩序を形成して高次機能を発現する仕組みを分子科学の観点から解き明かすことを目指しています。

特に、タンパク質や脂質、複合糖質から構成される生命分子システムの動的秩序形成におけるマイクロマクロ相関の探査を可能とする手法を開発し、これ

を応用した生命分子集合・離散系の動態観測を高精度で実現することを目指しています。これにより、生命分子素子がダイナミックな集合離散を通じて動的な秩序構造を形成するメカニズムを明らかにするとともに、生命分子集団の自己組織系に内在する精緻にデザインされた不安定性をあぶり出し、機能発現にいたる時空間的展開の原理を理解することを目指します。また、生命分子システムのデザインルールを取り入れた人工自己組織化システムの創生に資することを目的とした研究を行っています。生命超分子集合体は、外部環境の変動や超分子集合体間でのコミュニケーションを通じて時空間的発展を遂げています。生命分子システムの有するこうした特徴の本質を深く理解し、それを積極的に人工超分子系の設計に取り入れることは、分子科学におけるパラダイムシフトをもたらすものと考えています。

参考文献

- 1) T. Yamaguchi, T. Uno, Y. Uekusa, M. Yagi-Utsumi, and K. Kato, "Ganglioside-embedding small bicelles for probing membrane-landing processes of intrinsically disordered proteins," *Chem. Commun.* **49**, 1235-1237 (2013).
- 2) K. Kumoi, T. Satoh, K. Murata, T. Hiromoto, T. Mizushima, Y. Kamiya, M. Noda, S. Uchiyama, H. Yagi, and K. Kato, "An archaeal homolog of proteasome assembly factor functions as a proteasome activator," *PLoS ONE* **8**, e60294 (2013).
- 3) M. Yagi-Utsumi, T. Kuniyama, T. Nakamura, Y. Uekusa, K. Makabe, K. Kuwajima, and K. Kato, "NMR characterization of the interaction of GroEL with amyloid β as a model ligand," *FEBS Lett.* **587**, 1605-1609 (2013).

- 4) E. Kurimoto, K. Kuroki, Y. Yamaguchi, M. Yagi-Utsumi, T. Igaki, T. Iguchi, K. Maenaka, and K. Kato, "Structural and functional mosaic nature of MHC class I molecules in their peptide-free form," *Mol. Immunol.* **55**, 393-399 (2013).
- 5) H. Yagi, N. Nakagawa, T. Saito, H. Kiyonari, T. Abe, T. Toda, S. W. Wu, K. H. Khoo, S. Oka, and K. Kato, "AGO61-dependent GlcNAc modification primes the formation of functional glycans on α -dystroglycan," *Sci. Rep.* **3**, Article number: 3288 (2013).

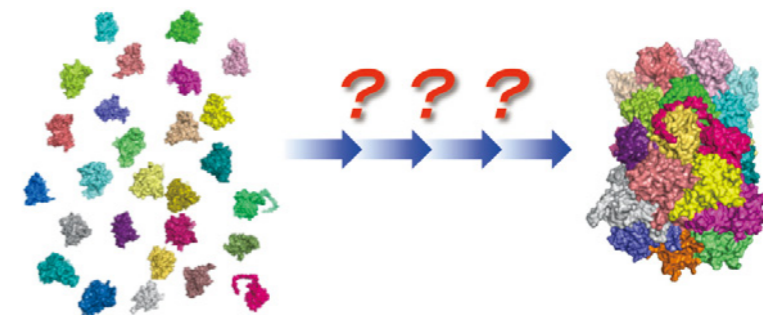
〈キーワード〉

生命分子

・
動的秩序

・
高次機能

・
NMR



生命分子のダイナミックな離合集散を通じた超分子装置の形成

■生体分子機能研究部門

生体分子機械の作動原理の解明、設計、創製



飯野 亮太 (教授)

1995年京都大学工学部卒、1997年京都大学大学院工学研究科修士課程修了、2000年名古屋大学大学院理学研究科単位取得退学、2003年博士(理学)。2000~2005年科学技術振興機構研究員、2005~2011年大阪大学産業科学研究所特任助手、助手、助教、2011~2014年東京大学大学院工学研究科講師、准教授を経て2014年6月より現職。

mail: iino@ims.ac.jp

生命活動は生物が進化の過程で創りだした様々な分子機械が担っています。生体分子機械はタンパク質や核酸で出来ていて大きさは数ナノメートル(10億分の1メートル)と小さいですが、たった1個、1分子で働くことができます。生体分子機械は高い基質選択性、反応特異性、エネルギー変換効率、可逆性など、人間が作った機械に負けない、またはそれ以上の高度な性能を発揮します。¹⁾ 私たちは生体分子機械の作動原理を、個々の分子機械の動きを観る、操作する、天然にない新しい分子機械を創る、といったアプローチで明らかにします。さらに、創った分子機械による生体の制御を目指します。

分子機械の代表格は、入力エネルギーを力学的仕事に変換して運動する分子モーターです。私たちは、新しいリニア分子モーター²⁾や回転分子モーター³⁾を研究しています。例えば、バイオエタノールの原料となる結晶性多糖を分解するセルラーゼやキチナーゼは、結晶性多糖を固液界面で分解しながら一方向に運動するリニア分子モーターです。駆動力源はATPではなくレールとなる多糖の加水分解エネルギーであり、ミオシン等の従来のリニア

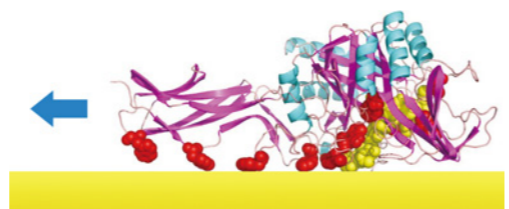
分子モーターとは作動原理が全く異なります。またセルラーゼやキチナーゼは異種分子を同時に作用させると結晶性多糖の分解効率が大きく増加する協調現象、「シナジー効果」が知られています。私たちは、セルラーゼ、キチナーゼの作動原理や協調現象の仕組みを明らかにすべく研究に取り組んでいます。

研究手法には、実際に機能している個々の分子機械を直接観察・操作する1分子計測を駆使します。^{4,5)} 光学顕微鏡とマイクロデバイスの融合⁶⁾、超解像蛍光顕微鏡と高速原子間力顕微鏡の複合機⁷⁾など、新規な1分子計測法の開発を行っています。さらに天然に存在する分子機械を計測するだけでなく、キメラ化、分子進化工学、計算科学によるデザイン、非天然アミノ酸導入等の手法を駆使し、新しい機能を持つ分子機械の創製を行います。積極的に創製して作動原理をボトムアップで理解するだけでなく、欲しい機能を持つ分子機械を自在にデザインする「分子機械設計学」の確立を目指します。さらに、創製した分子機械を生き物に戻してやることで細胞や個体の特性(運動性、サイズ等)を制御する「生体制御学」の確立を目指します。

参考文献

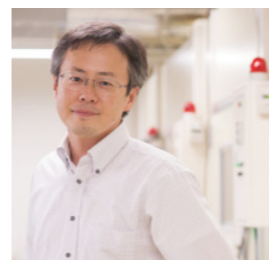
- 1) 飯野亮太 “モータータンパク質” [DOJIN BIOSCIENCE シリーズ: 揺らぎ・ダイナミクスと生体機能—物理化学的視点からみた生体分子—] 第15章1節 P233-242. 化学同人 2013.
- 2) Shibafuji Y, Nakamura A, Uchihashi T, Sugimoto N, Fukuda S, Watanabe H, Samejima M, Ando T, Noji H, Koivula A, Igarashi K, Iino R. Single-molecule imaging analysis of elementary reaction steps of *Trichoderma reesei* cellobiohydrolase I (Cel7A) hydrolyzing crystalline cellulose Ia and III. *J. Biol. Chem.* 2014 doi: 10.1074/jbc.M113.546085.
- 3) Minagawa Y, Ueno H, Hara M, Ishizuka-Katsura Y, Ohsawa N, Terada T, Shirouzu M, Yokoyama S, Yamato I, Muneyuki E, Noji H, Murata T, Iino R. Basic properties of rotary dynamics of the molecular motor *Enterococcus hirae* V₁-ATPase. *J. Biol. Chem.* 2013 **288**: 32700-32707.
- 4) Watanabe R, Tabata KV, Iino R, Ueno H, Iwamoto M, Oiki S, Noji H. Biased Brownian stepping rotation of F₀F₁-ATP synthase driven by proton motive force. *Nature Communications* 2013 **4**: 1631.
- 5) Uchihashi T, Iino R, Ando T, Noji H. High-speed atomic force microscopy reveals rotary catalysis of rotorless F₁-ATPase. *Science* 2011 **333**: 755-758.

- 6) Kim SH, Iwai S, Araki S, Sakakihara S, Iino R, Noji H. Large-scale femtoliter droplet array for digital counting of single biomolecules. *Lab Chip* 2012 **12**: 4986-4991.
- 7) Fukuda S, Uchihashi T, Iino R, Okazaki Y, Yoshida M, Igarashi K, and Ando T. High-speed atomic force microscope combined with single-molecule fluorescence microscope. *Review of Scientific Instruments* 2013 **84**: 073706.



新しいリニア分子モーター、キチナーゼ

協奏分子システム
研究センター



秋山 修志 (教授)

1997年京都大学工学部卒、1999年京都大学大学院工学研究科修士課程修了、2002年京都大学大学院工学研究科分子工学専攻博士課程修了、博士(工学)。日本学術振興会特別研究員、理化学研究所基礎科学特別研究員、科学技術振興機構さきがけ「生命現象と計測分析」研究員(専任)、名古屋大学大学院理学研究科講師/准教授を経て2012年4月より現職。2008年~現在理化学研究所播磨研究所客員研究員併任。TEL/FAX: 0564-55-7363 mail: akiyamas@ims.ac.jp

<キーワード>

- 生物時計
- 生体リズム
- 時計タンパク質
- 遅く秩序あるダイナミクス
- X線溶液散乱
- 動的構造解析

■階層分子システム解析研究部門

生物時計タンパク質が24時間周期のリズムを奏でる仕組みを解き明かす

しばしばメディアに登場する「生物(体内)時計」という言葉、皆さんがそれを改めて意識するのはどのようなときでしょうか。渡航や帰国後に頻発する眠気、だるさ、夜間の覚醒…、これらの症状は、私たちが生物時計の奏でる24時間周期のリズムのもとで生活していることの証です。驚くべきことに、生物は巧みな方法で、24時間という地球の自転周期を生体分子の内に取り込んでいます。当研究グループは、24時間周期の根源を分子科学的に解明するという研究テーマに挑戦しています。

生物が体内に時計を宿している…、このことが認知されるようになったのは最近のことです。それまでは24時間周期のリズミックな生命現象が見つかって、「地球の自転に依存した環境変化を計っているに過ぎない」と荒唐無稽な存在として扱われることもあったそうです。生物時計の実在性は後の数々の発見により確固たるものになります。その一つはタンパク質時計の発見です。シアノバクテリアと呼ばれる生物の時計は、3つの時計タンパク質(KaiA, KaiB, KaiC)だけで24時間を正確に刻むことができます。Kaiタンパク質とATPを試験管内で混合すると、KaiCはリン酸が付与された状態と付与されていない状態のあいだを24時間周期で振動します。この発見により、24時間周期のリズムを刻むタンパク質時計の存在が広く認められるようになりました。

一方、時を刻む仕組みの分子科学的理解は進んでいません。¹⁾ Kaiタンパク質時計を例に挙げれば、そのダイナミクスは最長24時間(10^{4.94}秒)に及ぶ幅広い時間領域に分布しています。タンパク質分子の運動においても時空間には階層性が認められ、大規模な構造変化ほどより時間を要することが

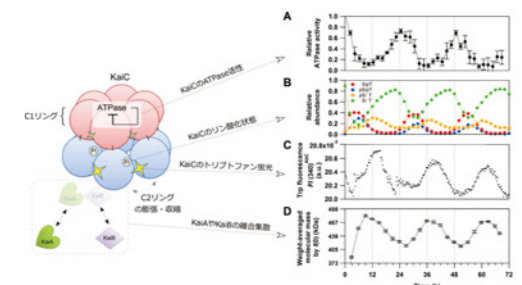
参考文献

- 1) 秋山 修志、近藤 孝男、"KaiCタンパク質による概日時間", 細胞工学, **30**, 1269-1276 (2011).
- 2) S. Akiyama, *Mol. Cell*, **29**, 703-716 (2008).
- 3) Y. Murayama, *EMBO J.*, **30**, 68-78 (2011).
- 4) 秋山 修志、向山 厚、"時計タンパク質KaiCの概日性分子鼓動" 実験医学, **29**, 1281-1284 (2011).
- 5) S. Akiyama, *CMLS*, **69**, 2147-2160 (2012).
- 6) 秋山 修志、"タンパク質によって操られている体内時計" 「放射光が解き明かす驚異のナノ世界」, 講談社ブルーバックス(2011).

知られています。とはいっても、溶液中を漂うKaiタンパク質が相互作用するダイナミクスはせいぜい10⁻²~10¹秒のオーダーですし、^{2,5)} 私たちが解明したKaiCの分子鼓動も24時間を要するほど劇的かつ複雑ではありません。^{3,4)} これまでの概念の積み上げでは、「タンパク質分子」という素材で24時間という遅いダイナミクスが実現されている理由を説明できそうにありません。⁵⁾

もう一つの謎が周期の温度補償性です。これは生物時計に普遍的に見いだされる特徴で、時計の発振周期が温度の影響をほとんど受けません。遅い反応(長い周期)は効率の悪い化学反応を挙げることで説明できるように一見思われます。しかし、そのような反応系は大きな活性化エネルギーを有し、温度の上昇に従って著しく加速されるのが一般的です。生物時計のからくりには、「遅いダイナミクス」と「温度補償性」という一見排他的な2つの性質を同時に説明しなければならないのです。

試験管内で再構成できるKaiタンパク質時計は、24時間周期や温度補償性を分子科学的に解明する絶好の研究対象と言えます。私たちの研究グループでは、生化学的な活性測定はもとより、X線結晶構造解析やX線溶液散乱を相補的に利用した動的構造解析、^{2,3,6)} 赤外や蛍光等による分子動態計測、³⁾ 計算機を用いた実験データのシミュレーションなどを行うことで、分子時計の実態解明に取り組んでいます。また、生物時計の研究を支える特殊な実験装置や解析ソフトウェアについても独自開発を進めています。このような研究活動を通して、多くの皆さんに生物、化学、物理、制御工学、計算科学を巻き込んだタンパク質時計研究のフロントティアを体験して頂ければと思います。



KaiCの分子鼓動³⁾ フィードバック制御下にあるATPase活性(A)をペースメーカーに、KaiCのリン酸化状態(B)やリング状の6量体構造(C)がリズムに変動する。KaiAやKaiBはKaiCの分子鼓動に呼応して離合集散し(D)、系の振動をより頑強なものとしている。

■階層分子システム解析研究部門

計算機および生化学実験によるタンパク質分子デザイン



古賀 信康(准教授)

2001年神戸大学理学部卒、
2006年神戸大学大学院自然科学研究科修了、理学博士。
神戸大学博士研究員、京都大学博士研究員、日本学術振興会海外特別研究員、ワシントン大学博士研究員を経て2014年4月より現職。

TEL: 0564-55-7365
mail: nkoga@ims.ac.jp

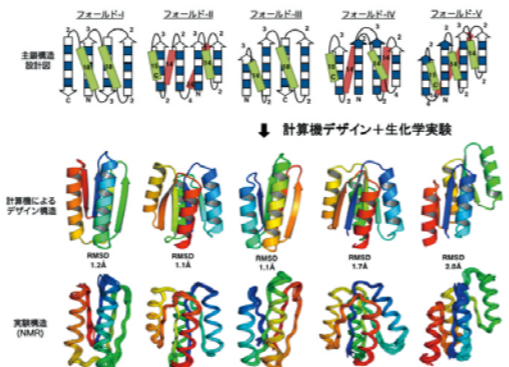
タンパク質分子は、アミノ酸配列に従ってほどけた紐のような状態から自発的に折りたたまり特異的な3次元立体構造を形成した後に、その3次元立体構造に基づき機能を発現することで、生命システムにおけるパーツとして様々な生命現象を生み出しています。現在私達が見ている自然界のタンパク質の姿は、自然が何十億年という時間をかけて精巧に創り上げた、いわば“完成品”であり、それらを解析するのみではタンパク質分子の動作メカニズムの本質を明らかにすることは困難です。そこで私達は、立体構造形成や機能発現に関する様々な仮説を立て、それらを基にタンパク質分子を計算機上でデザインし、そのデザインしたタンパク質分子が実際にどのように振る舞うのかを生化学実験によって調べることに伴って最初に立てた仮説を検証する、というアプローチにより研究を行います。すなわちタンパク質分子を創ることにより立体構造形成と機能発現原理の解明を行います。

私達はこれまでの研究において、「アミノ酸配列はどのような原理により折りたたみ後の構造を決定しているのか?」という問題に取り組んできました。この問題が解明されれば、アミノ酸配列に基づいて

折りたたむ立体構造を予測することも、またその逆に、望みの立体構造に折りたたむアミノ酸配列を自在にデザインすることも可能になります。計算機による折りたたみシミュレーションと自然界のタンパク質立体構造の統計解析を行った結果、 α ヘリックス、 β ストランド、ループの長さといった局所的な主鎖構造が3次構造のトポロジーの決定に重要であることを発見し、それらをルールとして体系化しました。そして、これらのルールを用いてタンパク質分子構造をデザインすることにより、世界で初めてシステムティックに α ヘリックスおよび β ストランド両方からなる様々なタンパク質の立体構造について原子レベルの精密さで完全にゼロから設計することに成功しました(図)。²⁾ 以上の結果は、アミノ酸配列の詳細というよりはむしろ局所的な主鎖構造が折りたたむ3次構造の決定に重要であることを示唆するものです。現在は、タンパク質の構造形成原理だけでなく、タンパク質がどのように構造変化し協同的な機能を発現しているのか、そのメカニズムの解明^{3,4)}を目指して機能性タンパク質のデザインに挑戦しています。

参考文献

- 1) Sarel J. Fleishman, Andrew Leaver-Fay, Jacob E. Corn, Eva-Maria Strauch, Sagar D. Khare, Nobuyasu Koga, Justin Ashworth, Paul Murphy, Florian Richter, Gordon Lemmon, Jens Meiler, and David Baker, RosettaScripts: A Scripting Language Interface to the Rosetta Macromolecular Modeling Suite, *PLoS ONE*, **6**(6), 1-10, 2011.
- 2) Nobuyasu Koga, Rie Tatsumi-Koga, Gaohua Liu, Rong Xiao, Thomas B. Acton, Gaetano T. Montelione and David Baker, Principles for designing ideal protein structures, *Nature*, **491**(7423), 222-227, 2012.



計算機による5つのトポロジーの新規立体構造デザイン

<キーワード>

タンパク質立体構造・機能

人工設計

計算機シミュレーション

生化学実験

■階層分子システム解析研究部門

光合成光捕獲系の機能解明を通して探る分子世界の自律性



石崎 章仁(特任准教授)

2008年京都大学大学院理学研究科博士課程修了、博士(理学)。2008年カリフォルニア大学バークレー校化学部化学科にて日本学術振興会海外特別研究員、2010年ローレンス・バークレー国立研究所物理生物科学部門博士研究員を経て、2012年3月より現職。

TEL: 0564-55-7310
FAX: 0564-53-4660
mail: ishizaki@ims.ac.jp

光合成は光という物理エネルギーを細胞が利用可能な化学エネルギーに変換する分子過程であり、糖の生成を通して地球上の全ての生命活動を維持しています。近年は再生可能エネルギーの観点からも注目され、エネルギー資源問題に定める緊急課題として光合成機構の仕組みを取り入れた分子素子の研究開発が進められています。

太陽光の強度が弱い場合には、捕獲された光エネルギーは色素分子の電子励起エネルギーとなりほぼ100%の量子収率で(!)反応中心タンパク質へ輸送され一連の電子移動反応を駆動します。広大な物理空間にありながら、また絶え間ない分子運動と揺らぎの中にありながら電子励起エネルギーはどのようにして反応中心へ迷子にもならず一意的に辿り着けるのでしょうか?

これまで私たちは、超高速レーザー分光の実験研究者と密に連携しながら量子散逸系動力学理論・非線形光学応答理論を駆使することで光合成光捕獲系におけるエネルギー移動ダイナミクスの様相を暴くことに取り組んできました。天然に存在する光捕獲系は従来の理論的枠組みでは取り扱いが困難なパラメータ領域にあり、その記述と理解が積年の難問でした。私たちは分光実験で得られた洞察そして数学的技術を総動員することで、光捕獲系は電子励起の量子力学的重ね合わせとタンパク質環境の揺らぎ・歪みのバランスを巧みに利用して

電子励起が迷子になるようなエネルギーの深い溝にトラップされるのを巧みに避けていること、エネルギー移動の速度が最適化されていることを議論してきました。これら一連の成果は光合成研究に携わる物理化学コミュニティだけでなく量子物理学の分野の研究者をも刺激しており思いがけない連携・進展が見られます。

しかし、光合成光捕獲系の機能は電子励起エネルギーを反応中心へ送り届けることではありません。強光下に曝された場合には、一重項酸素の生成などによる自らの損傷を防御するために過剰摂取した光エネルギーを熱として散逸させるという調整機構が作動することが知られています。外界変動からのフィードバック制御を含む種々の制御回路が働いていることも実験的に明らかとなりつつありますが、その詳細な分子機構についてはコンセンサスが得られておらず今なお活発な議論が続いています。

このように、光合成光捕獲系は卓越したエネルギー輸送能・変換効率能のみならず外界変動に対する頑健性および適応性(機能の再プログラム能)をも備えた自律的分子マシンと言えます。私たちは光合成初期過程を司る光物理化学の理解を深めることを通して、四季彩り豊かに躍動する自然の根幹を成す分子たちが織り成すしなやかな自律動作のデザイン原理に迫ろうとしています。

参考文献

- 1) A. Ishizaki & G. R. Fleming, "Unified treatment of quantum coherent and incoherent hopping dynamics in electronic energy transfer," *J. Chem. Phys.* **130**, 234111 (2009); (10 pages).
- 2) A. Ishizaki & G. R. Fleming, "Theoretical examination of quantum coherence in a photosynthetic system at physiological temperature," *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **106**, 17255-17260 (2009).
- 3) M. Sarovar, A. Ishizaki, G. R. Fleming & K. B. Whaley, "Quantum entanglement in photosynthetic light-harvesting complexes," *Nature Physics* **6**, 462-467 (2010).
- 4) A. Ishizaki, T. R. Calhoun, G. S. Schlau-Cohen & G. R. Fleming, "Quantum coherence and its interplay with protein environments in photosynthetic electronic energy transfer," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 7319-7337 (2010).
- 5) G. S. Schlau-Cohen, A. Ishizaki, Tessa R. Calhoun, Naomi S. Ginsberg, Matteo Ballottari, Roberto Bassi & Graham R. Fleming, "Elucidations of timescales and origins of quantum electronic coherence in LHCII," *Nature Chemistry* **4**, 389-395 (2012).

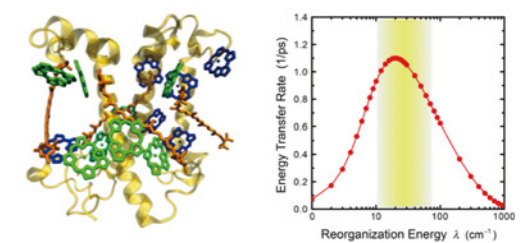
<キーワード>

光合成光捕獲系

凝縮相化学量子動力学理論

エネルギー移動・電荷移動反応

分子世界の自律性



(左)植物等の光合成系にみられる光捕獲タンパク質LHCIIの単量体。14個のクロロフィル(緑と青)と4個のカロテノイド(橙)から成り、外界の変動に応じてエネルギー輸送の担い手としても阻止装置としても動き得ると考えられています。(右)タンパク質環境の再配置エネルギーに対する2つの色素分子間の電子励起エネルギー移動速度。光合成光捕獲系に対応するパラメータ領域(黄色)でエネルギー移動速度が最適化されていることがわかります。

■階層分子システム解析研究部門

分子の究極測定理論の構築 ～誰が分子を見たのか?～



鹿野 豊(特任准教授)

2007年東京工業大学理学部卒、2009年同大学院理工学研究科修士、2011年博士課程修了、理学博士。内、マサチューセッツ工科大学機械工学科にて客員学生。日本学術振興会特別研究員(PD)を経て、2012年2月より現職。2011年よりチャップマン大学客員助教授。
TEL: 0564-55-7419
mail: yshikano@ims.ac.jp

昨今のナノテクノロジーと呼ばれる技術開発は著しく、1つの原子を測定し制御するというレベルに達してきています。これほどまでに、原子や分子などの小さなスケールを支配する法則は量子力学に他なりません。私はこれまで、量子基礎論や量子情報科学という研究分野において、量子力学に立脚した測定理論の解析的研究を主に行ってきました。私の研究スタイルは、量子化学の分野で頻繁に使われているスパコン「京」のような高性能な並列計算機を用いて研究するスタイルとは大きく違い、基本的には紙と鉛筆だけで出来る研究です。これらの道具だけで、どこまで分子科学の本質に迫れるのか?という挑戦をしに、不退転の決意で分子研にやってきました。新しい分子科学の問題を創り出すという課題です。分子は身の回りにありふれているものではあり、今ではこの存在を疑う人はほとんどいなくなりましたが、誰が直接分子の姿を見たことがあるのでしょうか? また、分子を単に見ただけで何か分かることがあるのでしょうか? 分子は時間的にその形を変え、またその機能を変えていくという不思議な存在です。これまで「測定とは何か?」という問題に携わってきましたが、一歩踏み込んで「何を測定し、そこから何が分かるのか?」という問題に具体的

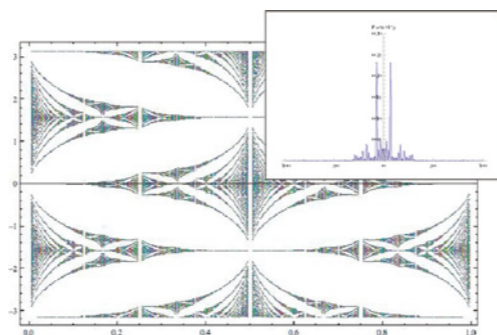
に分子というものを例にして突き止めたいと考えています。これらの問題を解決していくことで、我々が分子を自在に制御し分子を使った技術への転化が可能になると考えています。

また、分子の機能を発現する要因として、機能が発現している分子に直接関係しないマクロな系(熱浴)の存在というのが非常に重要になってきています。それらを支配する熱力学や統計力学といった物理法則は、もともと分子運動論の文脈で議論されてきました。そこでこれらを情報科学という観点を用いて操作論的に理解してみるという試みを行っています。マクロな系を特徴付けるエントロピーという概念はすべて操作論的観点から情報科学の文脈において捉え直して定義できるというプリルアンの考え方に従い、情報科学者であるシャノンが示した最適なデータ圧縮というものを用いてプリルアンの考え方を正当化し、それらの応用を考えています。

私は新参者で分子科学の領域にやってきましたが、何故巨大なデータベースが構築されつつある今、解析的研究で何が分かるのか?ということや、そもそも何をもって「分かる」というのか?という疑問を持ち続けながら日々机に向かっていきます。

参考文献

- 1) A. Hosoya and Y. Shikano, "Strange Weak Values", *J. Phys. A* **43**, 385307 (2010).
- 2) Y. Shikano and H. Katsura, "Localization and Fractality in Inhomogeneous Quantum Walks with Self-Duality", *Phys. Rev. E* **82**, 031122 (2010).
- 3) Y. Shikano and S. Tanaka, "Estimation of Spin-Spin Interaction by Weak Measurement Scheme", *Europhys. Lett.* **96**, 40002 (2011).
- 4) A. Hosoya, K. Maruyama, and Y. Shikano, "Maxwell's Demon and Data Compression", *Phys. Rev. E* **84**, 061117 (2011).
- 5) Y. Shikano, "Theory of "Weak Value" and Quantum Mechanical Measurements" in *Measurements of Quantum Mechanics* edited by M. R. Pahlavani (InTech, 2012) p. 75.



シンプルな法則から複雑でも規則のある現象を引き起こす例(バタフライ構造とフラクタル)



小林 玄器(特任准教授)

2006年金沢大学工学部物質化学工学科卒、2008年東京工業大学大学院総合理工学研究科物質電子化学専攻博士前期課程修了。2010年東京工業大学大学院総合理工学研究科物質電子化学専攻博士後期課程修了(博士(理学))。2010年東京工業大学総合理工学研究科物質電子化学専攻博士研究員。2011年神奈川大学工学部物質生命化学科助教。2012年科学技術振興機構さきかけ研究者兼務(2016年まで)。2013年分子科学研究所特任准教授。
TEL: 0564-55-7440
mail: gkobayashi@ims.ac.jp

<キーワード>

- 酸水素化物
- ・
- ヒドリド導電
- ・
- 固体イオニクス
- ・
- エネルギー貯蔵・変換デバイス
- ・
- 無機材料合成
- ・
- 結晶構造解析

■階層分子システム解析研究部門

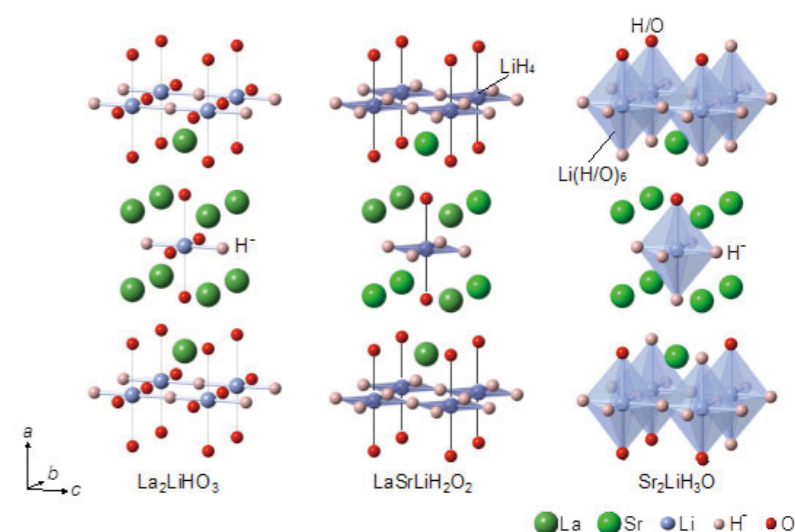
酸水素化物を基軸とした新物質合成:新機能の創出と電気化学デバイスへの展開

酸化物が持つ種々の物性は、金属とアニオンの相互作用に強く依存しています。このため、価数、電気陰性度、イオン半径が異なる複数のアニオンから構成される複合アニオン化合物は、新たな物性の発現が期待されており、物質探索の対象として盛んに研究されています。我々は、結晶格子内に水素のアニオンであるヒドリド(H⁻)と酸素が共存する酸水素化物に着目しています。酸水素化物は、ヒドリドの電子がs軌道のみを占有していることから、酸フッ化物や酸窒化物などの他の複合アニオン化合物と比較して格子と電子の相互作用が大きく異なると考えられ、新奇物性の発現が期待されます。また、一価のアニオンであり、フッ化物イオンと同程度のイオン半径を持つヒドリドは、サイズ・価数の観点でイオン導電に適した特徴を持っています。さらに、標準酸化還元電位が-2.25V (vs. SHE)と碑に大きく、ヒドリドのイオン導電現象は高エネルギー密度のエネルギー貯蔵・変換デバイスに応用できる可能性があります。

酸水素化物は、水素をヒドリドの状態では格子内に留めることの難しさから、これまで僅かな物質しか報告されていませんでした。これに対して我々は、高圧合成法を適用することで極めて広い固溶域を持つ新規酸水素化物La_{2-x-y}Sr_{x+y}LiH_{1-x+y}O_{3-y}(-1≤x≤1, 0≤y≤2)を合成し、カチオンの元素置換

という極めて一般的な方法で酸水素化物中のヒドリド含有量と原子配列の制御に初めて成功しています。La_{2-x-y}Sr_{x+y}LiH_{1-x+y}O_{3-y}は、下図に示すような結晶構造をとり、ヒドリド含有量の増加に伴って結晶格子内におけるヒドリドの配列が一次元から二次元、三次元へと変化します。さらに最近では、これらの物質が300°C以下の温度域でヒドリド導電性を示すことを明らかにし、ヒドリド導電現象を利用した新型電池の電解質として利用することに成功しています。我々は、これまでに得られた実験結果を基に、ヒドリド超イオン導電体の開発とヒドリドのイオン導電機構の解明を目指し、ヒドリド導電現象を利用した次世代電気化学デバイスの実現に向けて研究を展開していきます。

また、遷移金属を含む酸水素化物の物質探索も並行して検討します。これまでに報告されている遷移金属酸水素化物は、遷移金属の価数が酸化物では取り得ない異常な原子価になることが多く、ヒドリドを格子内に安定にできる配位環境が他の複合アニオン化合物とは根本的に異なると考えられます。我々は、これまでに検討してきた非遷移金属系の酸水素化物の合成で得られた知見を活かして、遷移金属酸水素化物の物質設計指針を構築し、新奇物性を示す物質の合成を目指します。



新規酸水素化物La_{2-x-y}Sr_{x+y}LiH_{1-x+y}O_{3-y}(x=0, y=0,1,2)の結晶構造

<キーワード>

- 量子測定
- ・
- 制御
- ・
- 情報科学

■機能分子システム創成研究部門

分子を使った新しいエレクトロニクスを開拓する



山本 浩史(教授)

1993年東京大学理学部化学科卒業、1998年同大学大学院理学系研究科博士課程修了、博士(理学)、1998年学習院大学理学部物理学科助手、1999年理化学研究所基礎科学特別研究員、2000年同研究員、2007年同専任研究員を経て、2012年4月より現職。

TEL: 0564-55-7334

FAX: 0564-55-7325

mail: yhiroshi@ims.ac.jp

〈キーワード〉

有機エレクトロニクス

● 有機FET

● 強相関電子系

● 超伝導

● モット絶縁体

● モット転移

● 超分子

● ナノワイヤー

● ハロゲン結合

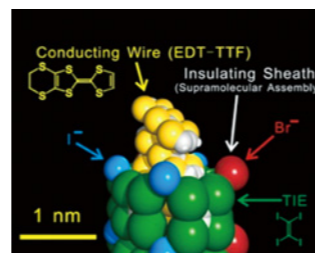
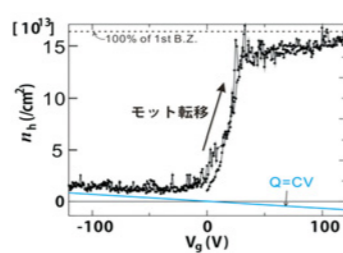
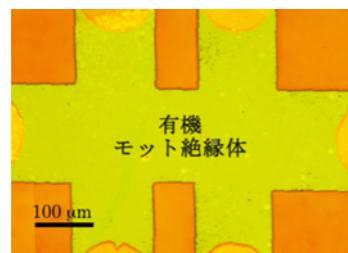
● 分子素子

● 3次元ナノ配線

新しいエレクトロニクスの担い手としてπ電子が注目を集めています。軽くて曲げられるトランジスタとして最近盛んに研究されている有機トランジスタ(Organic Field Effect Transistor = OFET)や、2010年にノーベル賞を受賞したグラフェンなどがその代表例と言えるでしょう。我々の研究室では、π電子による新しいエレクトロニクスの創成を目指して、これまでとは違った独創的なデバイスの提案を、化学の力で実現していこうと研究に取り組んでいます。具体的には、以下の2つのテーマについて研究を行っています。

(1)π電子エレクトロニクスの中でも非常に特異な性質をもつ、「強相関π電子」を使ったトランジスタの開発に取り組んでいます。強相関電子系というのは、電子間のクーロン相互作用が強く働き、通常の伝導電子とは異なった振る舞いをする電子系のことです。ほんの少し電子数を増やしたり減らしたりするだけで、急に電子が固まって絶縁体になったり、急に流れだして金属になったりします。(不思議なことに、 $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ などの銅酸化物高温超伝導体の伝導電子はこの仲間属することが分かっています。)そしてFET(電界効果トランジスタ)構造の仕組みを利用して有機物中の「強相関電子」の数を変化させると、上に述べたような現象が実際に起こって、絶縁体を金属や超伝導にスイッチ(相転移)させることができます。我々は世界で初めて、こうした相転移をOFET界面において観測することに成功しました(左図、中央図)。また最近では、超伝導状態のON/OFFが電界効果でスイッチ出来るような有機デバイスを開発し、その詳細について調べています。

(2)近年、半導体微細加工技術が進展し、回路のハーピッチが20nmに近付いてきました。あともう



(左図)有機モットFETの顕微鏡写真(中央図)有機モットFETにゲートをかけたときの界面キャリア密度変化。静電界によって誘起されたキャリアよりもはるかに多数のキャリアが突然動き出す様子を表している。(右図)超分子ナノワイヤーのCPKモデルによる構造図。中央の黄色い分子が伝導性の1次元分子鎖を形成し、その周囲を緑色の絶縁分子が被覆している。

少し回路の微細化が進むと、結晶中の分子間ピッチと同程度のサイズでパターンニングが出来るようになります。回路がここまで小さくなると、分子1つを電子素子と見なす「分子素子」の考え方が有効になってきます。分子の形は有機合成によって非常に微細に制御できる上に、一度に 10^{23} 個程度の大量の素子合成ができるため、分子素子が実現すれば安価で大容量のメモリが作製できる可能性があります。

しかしながら、こうした分子素子に対しては配列・配線技術が未だに確立していません。そこでこれに応える一つの解として、結晶性のナノワイヤー配線に取り組んでいます。結晶中では、同じ構造パターンが3次元的に繰り返していますから、分子素子とナノワイヤーを同時に結晶化出来れば、結晶そのものが大規模のメモリとなる仕掛けです。これまでに伝導性のワイヤーを超分子で絶縁被覆した結晶構造(右図)の構築と、その物性評価に成功しました。今後は3次元配線のための重要なステップとして、直交ナノワイヤーによるcross-bar構造の構築に取り組んでいきます。

参考文献

1) H. M. Yamamoto, M. Nakano, M. Suda, Y. Iwasa, M. Kawasaki and R. Kato "A strained organic field-effect transistor with a gate-tunable superconducting channel" *Nature Commun.* **4**, 2379/1-2379/7 (2013).
 2) Y. Kawasugi, H. M. Yamamoto, N. Tajima, T. Fukunaga, K. Tsukagoshi, and R. Kato "Field-Induced Carrier Delocalization in the Strain-Induced Mott Insulating State of an Organic Superconductor" *Phys. Rev. Lett.*, **103**(11), 116801/1-116801/4 (2009).
 3) H. M. Yamamoto, Y. Kosaka, R. Maeda, J. Yamaura, A. Nakao, T. Nakamura, and R. Kato "Supramolecular Insulating Networks Sheathing Conducting Nanowires Based on Organic Radical Cations" *ACS Nano*, **2**(1), 143-155 (2008).



村橋 哲郎(教授)

1995年大阪大学工学部卒、1997年同大学院工学研究科博士前期課程修了、1999年同大学院博士後期課程修了(工学博士)、1999年大阪大学大学院工学研究科助手(助教)、2007年同准教授、2012年4月より現職。2003年~2005年日本学術振興会海外特別研究員(米国MIT化学科)兼務、2005年~2009年および2010年~現在科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業PRESTO研究者兼務。

TEL: 0564-59-5580

mail: mura@ims.ac.jp

〈キーワード〉

遷移金属錯体

● 有機金属化合物

● 合成化学

● 反応機構

● 物性解明

■機能分子システム創成研究部門

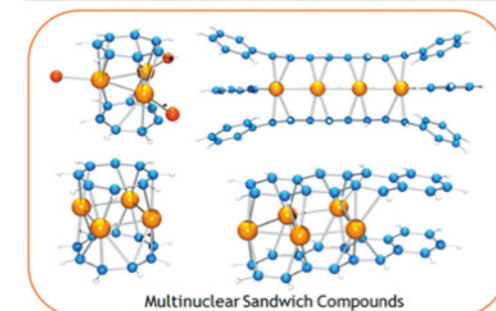
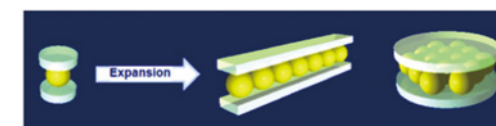
遷移金属化合物の統合的基礎研究—合成・構造・反応機構・物性・触媒

我々のグループでは、これまでにない化学構造を持つ遷移金属化合物を創出し、その化学を展開する研究を行っています。最近、我々はサンドイッチ化合物と呼ばれる遷移金属錯体の構造原理を大きく拡張し、新しい化合物群を創出することに成功しています。メタロセン類に代表されるサンドイッチ化合物は、一般教科書にも広く掲載されている重要な有機金属化合物群であり、その化学構造の概念は確立されたものと考えられていました。すなわち、シクロペンタジエニルやベンゼンなどの不飽和炭化水素配位子の間に固定できる金属原子の数は、1つか2つに限定されると考えられてきました。しかし、我々はこの常識を覆し、平行に配置された2つの不飽和炭化水素間に多数の金属原子が挟み込まれたサンドイッチ化合物が安定に存在することを初めて明らかにしました。例えば、金属原子が一列に整列した金属鎖構造を持つサンドイッチ化合物や、金属原子がシート状に整列することで生じる金属シートを持つサンドイッチ化合物が合成・単離可能であることを実証しています。

新しい構造を持つ遷移金属化合物を合成すると、そこから新しい現象が次々と明らかになっていきます。我々が見出した多核サンドイッチ化合物も、興味深い性質を示すことがわかりつつあります。π-共役系不飽和炭化水素配位子が金属鎖上でスライドする挙動を示したり照射により面反転を起こすことがわかってきたほか、レドックスに伴い金属鎖が2つに分裂すること、さらには一旦分裂した金属鎖が元通りにつながる挙動などを明らかにしています。我々が創出した新しい遷移金属化合物群の化学は、今後、さらなる展開が期待されています。

参考文献

1) Murahashi, T.; Shirato, K.; Fukushima, A.; Takase, K.; Suenobu, T.; Fukuzumi, S.; Ogoshi, S.; Kurosawa, H. "Redox-induced Reversible Metal Assembly through Translocation and Reversible Ligand Coupling in Tetranuclear Metal Sandwich Frameworks" *Nature Chem.* 2012, **4**, 52.
 2) Murahashi, T.; Takase, K.; Oka, M.; Ogoshi, S. "Oxidative Dinuclear Addition of a Pd-Pd' Moiety to Arenes: Generation of $\mu-\eta^3-\eta^3$ -Arene-Pd₂ Species" *J. Am. Chem. Soc.* 2011, **133**, 14908.
 3) Murahashi, T.; Usui, K.; Inoue, R.; Ogoshi, S.; Kurosawa, H. "Metalloids of Platinum: Syntheses and Structures of Triangular Triplatinum Sandwich Complexes of Cycloheptatrienyl" *Chem. Sci.* 2011, **2**, 117.
 4) Murahashi, T.; Inoue, R.; Usui, K.; Ogoshi, S. "Square Tetrapalladium Sheet Sandwich Complexes: Cyclononatrietraenyl as a Versatile Face-Capping Ligands" *J. Am. Chem. Soc.* 2009, **131**, 9888.



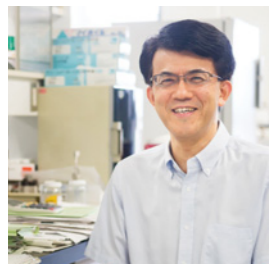
多核サンドイッチ型錯体の構造概念と、我々が合成した最初の多核サンドイッチ型錯体の例

我々のグループでは、遷移金属錯体の反応機構に関する研究も進めています。遷移金属錯体は、化学変換反応における触媒として働きますが、我々は、その反応原理を速度論的手法や立体化学手法なども用いながら詳細に解明しようとしています。例えば、触媒として重要でありながら、これまでその反応性を調べることが難しいとされていたパラジウムクラスターについて、反応パターンを系統的に解明する研究を進めており、これまでに知られていなかった素反応を明らかにしています。最近では、Pd-Pd結合種がオレフィン類や芳香族化合物に二核付加することを解明しています。こうして得られる反応機構の知見に基づいて新しい遷移金属錯体の分子設計をおこない、実現が難しいとされてきた化学変換反応を可能にする研究を進めています。

5) Murahashi, T.; Hashimoto, Y.; Chiyoda, K.; Fujimoto, M.; Uemura, T.; Inoue, R.; Ogoshi, S.; Kurosawa, H. "Reductive Coupling of Metal Triangles in Sandwich Complexes" *J. Am. Chem. Soc.* 2008, **130**, 8586.
 6) Murahashi, T.; Fujimoto, M.; Kawabata, Y.; Inoue, R.; Ogoshi, S.; Kurosawa, H. "Discrete Triangular Tripalladium Sandwich Complexes of Arenes" *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007, **46**, 5440.
 7) Murahashi, T.; Kato, N.; Uemura, T.; Kurosawa, H. "Rearrangement of a Pd₃ Skeleton from a 1D Chain to a 2D Sheet on the Face of a Perylene or Fluoranthene Ligand Caused by Exchange of the Binder Molecule" *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007, **46**, 3509.
 8) Murahashi, T.; Fujimoto, M.; Oka, M.; Hashimoto, Y.; Uemura, T.; Tatsumi, Y.; Nakao, Y.; Ikeda, A.; Sakaki, S.; Kurosawa, H. "Discrete Sandwich Compounds of Monolayer Palladium Sheets" *Science*, 2006, **313**, 1104.

■機能分子システム創成研究部門

プラスチックエレクトロニクスのための有機半導体の開発



鈴木 敏泰(准教授)

1985年名古屋大学理学部卒、1987年名古屋大学理学研究科前期課程修了、1992年カリフォルニア大学サンタバーバラ校博士課程修了、Ph.D.。分子科学研究所助手、1995年NEC基礎研究所を経て1998年1月より現職。
TEL: 0564-59-5530
FAX: 0564-59-5532
mail: toshy@ims.ac.jp

半導体といえばシリコンなどの無機物を思い浮かべますが、最近では有機物の半導体による有機EL(発光素子)、トランジスタ、太陽電池が開発されています。これらの有機デバイスは、薄い、フレキシブルといったシリコンデバイスにはない優れた特徴を持っています。我々のグループは有機合成化学が専門であり、プラスチックエレクトロニクスのための新しい有機半導体を設計・合成しています。

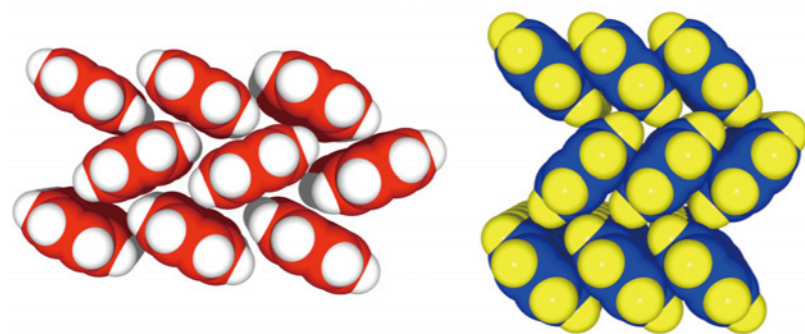
半導体にはp型とn型の2種類あります。p型では、正孔(ホール)がキャリアとなり、プラスの電荷が固体中を移動していきます。一方、n型では電子が主体となります。有機半導体の研究はすでに半世紀以上の歴史がありますが、デバイス材料として使われ始めたのは1980年代の後半からです。有機物の場合、カチオンラジカル(正孔)のほうがアニオンラジカル(電子)より安定となる物質が多くあります。そのため、p型半導体の研究が主流となり、n型半導体の有機材料はあまり知られていませんでした。アニオンラジカルは、分子上に余分な電子が1個あるわけですから、これを安定化させるような構造を考えてやればよいわけです。このためには、n電子をたくさん持つベンゼンのような芳香族分子を用い、さらに、余分な電子を吸収してくれる置換基を取り入れる方法が有効です。

我々は、電子求引基としてフッ素に注目しました。フッ素はすべての元素の中で電気陰性度が最も高く、サイズは炭素より小さく、さらに、炭素-フッ素結合はすべての共有結合の中で最も強いといった

特徴を持ちます。しかしながら、完全にフッ素化された芳香族分子は非常に少なく、電子材料としての報告もありませんでした。我々は、これまでにオリゴフェニレン¹⁾、オリゴチオフェン²⁾、ペンタセン³⁾およびオリゴフルオレン⁴⁾の完全フッ素化を行い、有機ELおよびトランジスタを作製してきました。これらの成果により、最近ではフッ素化芳香族化合物のn型半導体材料としての評価が高まってきました。特にフッ素化ペンタセン(図右)は、トランジスタ材料あるいは基礎科学の対象として、国内外の研究者の注目を集めています。

参考文献

- 1) S. B. Heidenhain, Y. Sakamoto, T. Suzuki, A. Miura, H. Fujikawa, T. Mori, S. Tokito and Y. Taga, "Perfluorinated Oligo(p-phenylene)s: Efficient n-Type Semiconductors for Organic Light-Emitting Diodes," *J. Am. Chem. Soc.* **122**, 10240-10241 (2000).
- 2) Y. Sakamoto, S. Komatsu and T. Suzuki, "Tetradecafluorosexithiophene: The First Perfluorinated Oligothiophene," *J. Am. Chem. Soc.* **123**, 4643-4644 (2001).
- 3) Y. Sakamoto, T. Suzuki, M. Kobayashi, Y. Gao, Y. Fukai, Y. Inoue, F. Sato and S. Tokito, "Perfluoropentacene: High-Performance p-n Junctions and Complementary Circuits with Pentacene" *J. Am. Chem. Soc.* **126**, 8138-8140 (2004).
- 4) K. Ohkubo, Y. Sakamoto, T. Suzuki, T. Tsuzuki, D. Kumaki and S. Tokito, "Synthesis, Structure, and Transport Property of Perfluorinated Oligofluorenes" *Chem. Eur. J.* **14**, 4472-4474 (2008).



有機半導体であるペンタセン(左)とフッ素化ペンタセン(右)の結晶構造

極端紫外光研究施設(UVSOR)

光は、その波長によって、赤外線、可視光線、紫外線、極端紫外線、X線、と様々な名前で呼ばれます。この様々な波長域の光を一度に出すことのできる装置がシンクロトロン光源です。高エネルギーの電子ビームが高磁場で発するシンクロトロン光は、あらゆる波長域において高強度で指向性が高く、分子科学を始め幅広い研究分野で利用されています。分子科学研究所の極端紫外光研究施設は1983年に稼働を始めたシンクロトロン光源ですが、幾度かの改良を経て、現在でも、極端紫外線から赤外線・テラヘルツ波に至る低エネルギーのシンクロトロン光源として世界最高水準の高輝度性を誇っています。その特性を活かして、物質の機能性の起原である電子状態の直接観測が行われています。UVSORという愛称で世界的に知られ、国内のみならず世界各地から利用者を受け入れています。



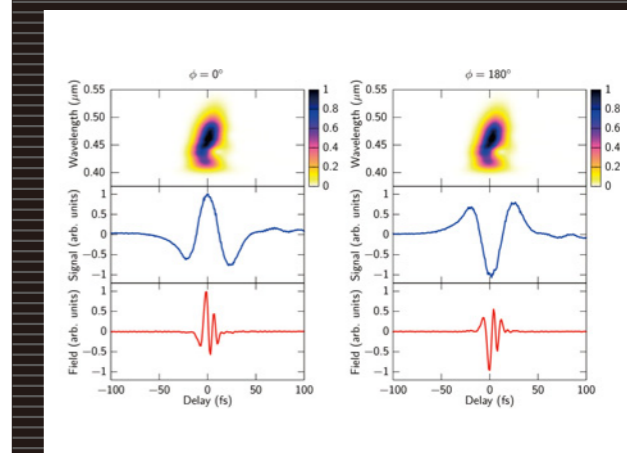
UVSOR施設



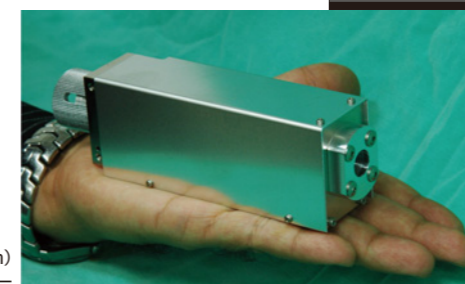
UVSORのシンクロトロン光を用いた走査型透過X線顕微鏡装置

分子制御レーザー開発研究センター

本センターは、光分子科学研究領域との連携のもとに、分子科学の新分野を切り拓くための装置、方法論の開発研究を行う施設です。新たに開発される装置や方法論は、所内外の分子科学者との先端的な共同研究のリソースとして提供されることを意図しています。主な開発研究分野としては、(1)テラヘルツから軟X線にいたる先端光源の開発、(2)高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発、(3)高分解能光イメージングとナノ領域顕微分光法の開発などが挙げられます。また、本センターは理化学研究所との連携融合事業であるエクストリームフォトニクスの中核センターとしての役割を果たしています。



当センターで開発された光電場計測手法で計測した7フェムト秒の赤外光パルス電場波形



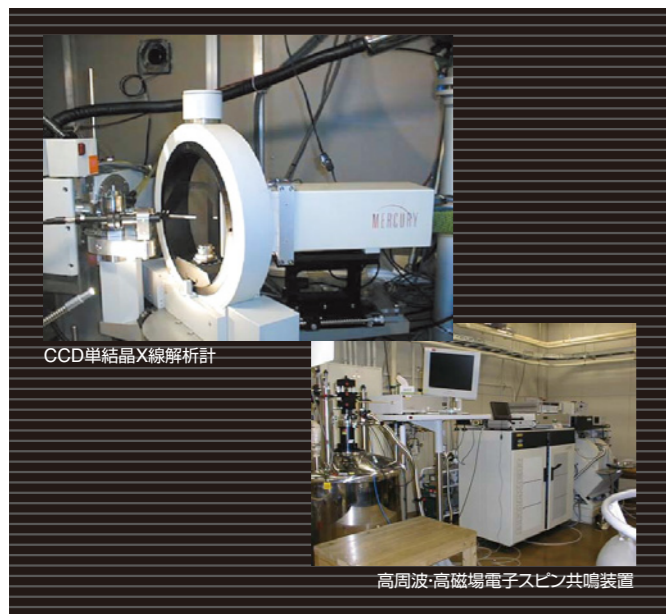
当センターで開発したパルス紫外(266 nm)マイクロチップレーザー

<キーワード>

有機半導体

有機EL

有機トランジスタ



CCD単結晶X線解析計

高周波・高磁場電子スピン共鳴装置

機器センター

機器センターは分子スケールナノサイエンスセンターと分子制御レーザー開発研究センターの汎用機器を統合して、平成19年4月に新たに発足しました。機器センターでの主たる汎用機器は山手地区のNMR、質量分析装置、粉末X線回折装置、円二色性分光装置、明大寺地区のESR、SQUID磁束計、X線回折装置(粉末、単結晶)、波長可変ピコ秒レーザーシステム、蛍光分光装置、紫外可視近赤外分光装置などです。共同利用の形態は施設利用が主ですが、レーザーと上記の汎用機器を組み合わせた特殊仕様の実験も支援します。この他、山手地区と明大寺地区にある液体ヘリウム液化装置や液体窒素貯蔵槽を用いて、液体ヘリウム・液体窒素の供給を行っています。また、平成19年4月に発足した化学系研究設備有効活用ネットワーク(現 大学連携研究設備ネットワーク)の汎用機器の共同利用も支援しています。



マスクアライナー

プリント基板加工機

PCB設計

装置開発室

装置開発室では、分子科学研究に必要な様々な実験装置の製作・開発を行っています。機械、エレクトロニクス、微細加工などの設備を有し、高度な技術・技能を有する技術者が配属されています。研究所創設当初から、所内外の研究者と密接に連携し、独創的な研究を可能とする様々な実験装置の開発を手掛けてきました。将来の分子科学研究を支えるために、より先進的な技術の習得にも積極的に取り組んでいます。研究者や学生に対して機械加工や電子回路工作に関する講習会を開催し、技術の普及にも努めています。

計算科学研究センター

我が国唯一の分子科学分野の理論計算科学研究のための共同利用施設です。先導的な学術研究の発信はもとより、岡崎地区の3研究所と全国の分子科学とバイオサイエンスの研究者に対して、大学等では不可能な大規模計算を実行できるハード環境と様々なプログラムソフトを提供しています。平成23年度導入の「超高速分子シミュレータ」に加え、平成24年度には「高性能分子シミュレータ」も導入し、大規模な計算が実行できる環境を提供しています。

岡崎統合バイオサイエンスセンター

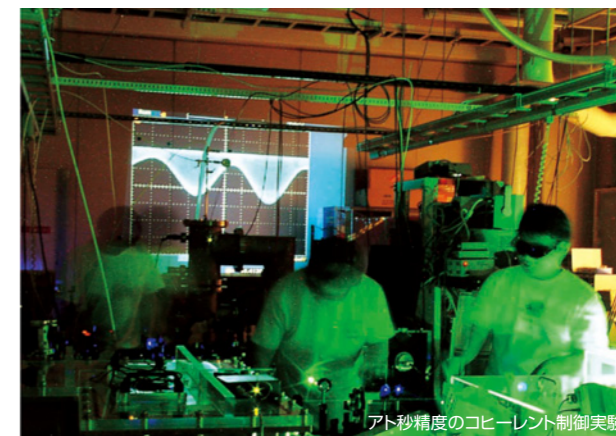
本センターは、分子科学、基礎生物科学、生理科学などの学際領域にまたがる諸問題に対し、総合的な観点と方法論を適用、駆使することにより、新しいバイオサイエンスを切り開くことを目的とし、分子研、基生研、生理研の三研究所の共通研究施設として設立されました。分子科学研究に関連する教員として、教授3名、准教授1名が所属しています。



超高速分子シミュレータ

先端的な研究を推進する拠点事業

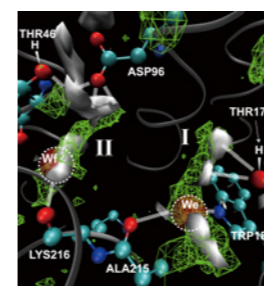
分子科学研究所は他大学や研究機関と連携し、様々なプロジェクトを推進しています。光分子科学研究に関連するものとして、理化学研究所と連携してエクストリームフォトニクス事業、ならびに、大阪大学・京都大学・日本原子力研究開発機構との連携による融合光新創世ネットワークを推進しています。これらの事業では、レーザーを活用して最先端の光を作り出し、物質のミクロな性質の詳細な観測、さらに高度な制御を実現することを目指しています。



アト秒精度のコヒーレント制御実験



◀「融合光新創世ネットワーク」が主催したシンポジウムの模様



計算分子科学研究に関連するものとしては、HPCI戦略プログラムがあります。このプログラムは、「計算物質科学：基礎科学の源流からデバイス機能とエネルギー変換を操る奔流へ」を戦略目標として掲げ、次世代スーパーコンピュータ「京」の性能を最大限に発揮することを目指しています。分子科学研究所は、物質・エネルギー創成の分野で貢献するために「計算分子科学研究拠点(TCCI)」を設置し、東京大学物性研究所、東北大学金属材料研究所と連携して戦略プログラムの事業を推進しています。

◀ 研究課題の一つ「凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス」におけるMC-MOZ法により計算したバクテリオロドプシン内部の水の分布と実験の比較

国内の研究者への共同研究・共同利用支援に関する事業

国内・海外の研究者が分子研を訪れ、施設や機器を利用しています。

分子科学研究所は、UVSOR、および、計算科学研究センターなどの大型施設を、「施設利用」として当該分野コミュニティの研究者に広く利用して頂いています。また、分子制御レーザー開発研究センター、機器センターなどの研究センター、装置開発室において、先端的な装置を利用して共同で研究を進めて頂くとともに、測定法や物質合成手法の開発などを支援しています。さらに、これらセンターならびに各研究領域における研究資源を利用しながら、所内の教員と複数の所外研究者との連携の下で行う「課題研究」、

所内の教員と一対一で共同研究を行う「協力研究」も実施しています。また、「大学連携研究設備ネットワーク」の中核拠点として、分子科学領域における先端的な研究設備の相互利用による共同研究の促進にも取り組んでいます。これらのハードウェアを中心とした共同利用と共に、特定の課題に関する議論を深め、更なる新しい発展を探るための有効な手段として、所外の研究者の提案をもとにした研究会である「分子研研究会」、「若手研究会等」、「分子科学国際研究会(岡崎コンファレンス)」を毎年複数回開催しています。

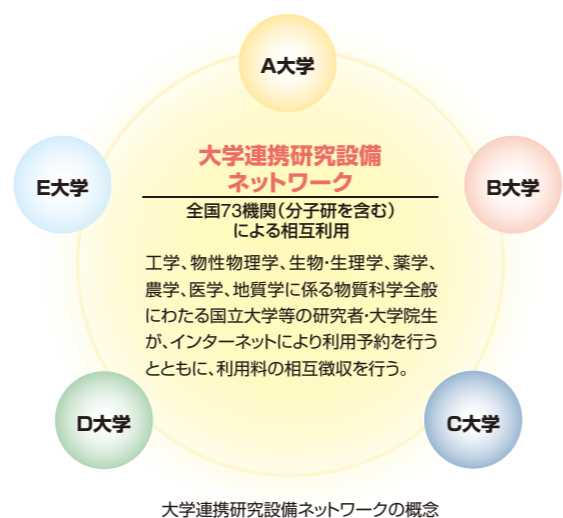
■ 共同利用研究実施一覧 平成25年度

実施内容	件数	人数
課題研究	2	27
協力研究(特別プロジェクト)	64(0)	173(0)
所長招へい	113	113
研究会	10	154
若手研究会等	1	21
岡崎コンファレンス	1	18
ナノプラット協力研究	51	122
ナノプラット施設利用	132	415
電子計算機施設利用	185	711
UVSOR施設利用	141	732
その他施設利用	41	107
合計	741	2,593



大学連携研究設備ネットワークの構築

分子科学研究所は、広く国内の研究者がインターネットを通じて色々な大学の設備を有効に活用するための組織である「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進」事業の事務局を務めています。本ネットワークには、全国の大学や企業を含めた130以上の機関が参加しており、600台以上の研究設備が相互利用のために公開されています。1万名に迫る研究者がユーザーとして登録されており、毎月5000件以上の利用実績があります。依頼計測も可能であり、有効に活用されています。



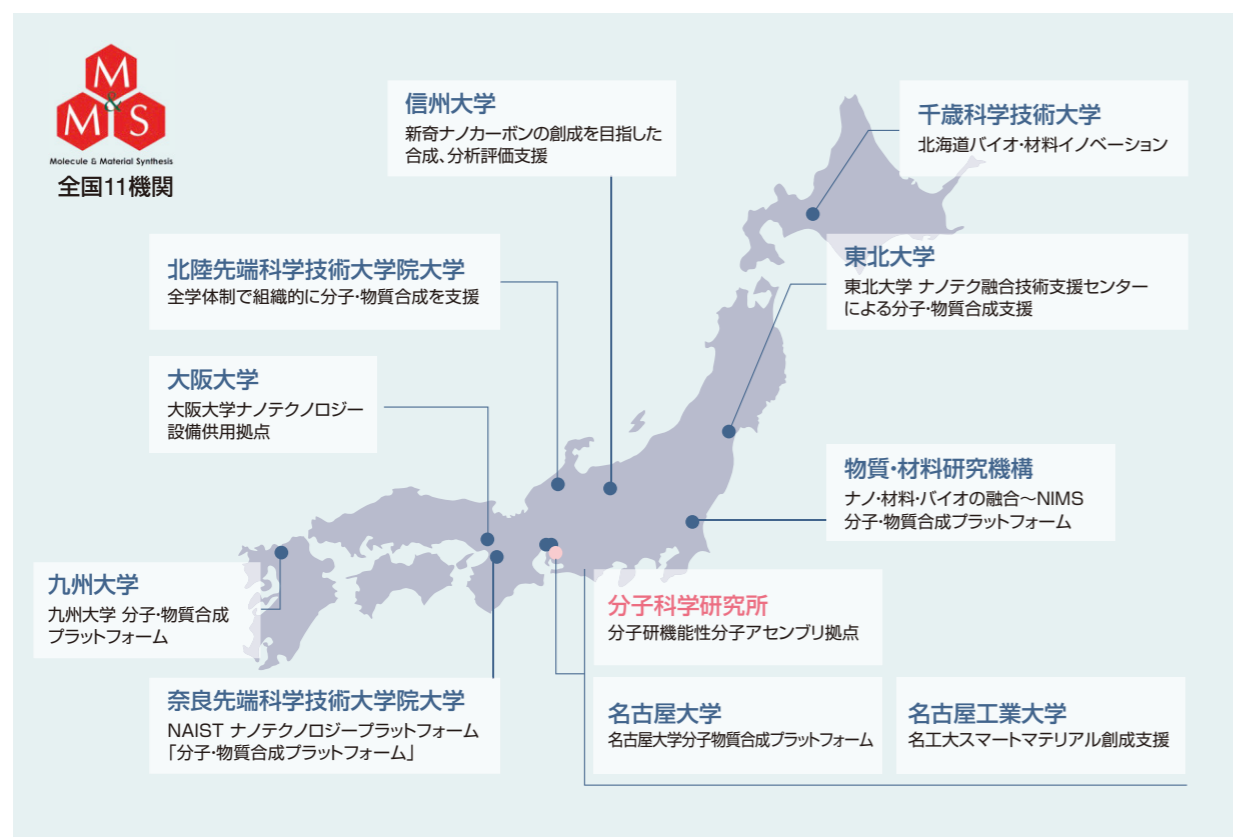
大学連携研究設備ネットワークの概念

ナノテクノロジープラットフォーム分子・物質合成

平成24年度から始まった文科省ナノテクノロジープラットフォーム事業は、最先端の研究設備とその活用のノウハウを有する機関が緊密に連携して全国的な設備の共用体制を共同で構築し、産業界や研究現場が有する技術的課題の解決へのアプローチを提供するとともに産学官連携や異分野融合を推進するものです。本事業

では、微細構造解析、微細加工、分子・物質合成の3つの全国規模のプラットフォームが構築され、分子研は、分子・物質合成の代表機関と実施機関を担うことになりました。詳細は下記URLにアクセスの上ご参照ください。

[事業全体] <https://nanonet.go.jp/> [代表機関] <http://mms-platform.com> [分子研] <http://nanoims.ims.ac.jp/ims/>



世界に広がるネットワークの構築

分子科学研究所は、国際的な分子科学研究の中核拠点としても積極的な役割を果たしています。

国際共同研究拠点の形成、若手研究者の人材育成

分子科学研究所は創設以来、多くの国際会議の開催、多数の外国人研究員の受け入れ、および国際共同研究事業の積極的な推進など、国際的に開かれた研究所としての役割を担ってきました。国際共同研究を更に推進するために、平成16年度より独自の国際共同研究事業を開始しています。この事業では、下記EXODASS事業、IMSアジアコア事業に加え欧米等を対象として、(1)分子研国際インターンシッププログラム、(2)分子研国際若手研究者招へいプログラム等の特長ある国際共同を推進しています。特に欧米の研究拠点等と学術交流協定を締結し、国際共同を重点化しています。

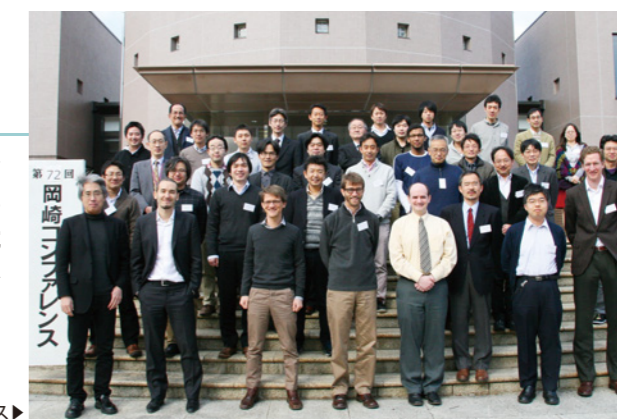
外国人研究者の国別内訳(平成24年度)

韓国	59	オーストラリア	5	スペイン	1
中国	42	ベトナム	4	スリランカ	1
ドイツ	26	イタリア	3	デンマーク	1
アメリカ	25	シンガポール	3	トルコ	1
フランス	24	カナダ	2	ノルウェー	1
インド	14	スウェーデン	2	バングラディシュ	1
イギリス	8	イスラエル	1	ポーランド	1
タイ	8	イラン	1	ヨルダン	1
台湾	8	スイス	1	合計	244(人)

岡崎コンファレンス

全国の分子科学研究者からの申請を受けて、それぞれの分野で世界トップクラスの研究者を数名招へいし、情報を相互に交換することによって当該分野の研究を国際的に最高レベルに高めるための研究会です。公募方式によって課題を募集し、毎年1件~数件程度を採択して開催しています。

第72回岡崎コンファレンス



アジア・オセアニア若手研究者招聘プログラムEXODASS

21世紀東アジア青少年大交流計画(JENESYSプログラム)の後継プログラム「EXODASS」によって、アジア諸国の若手研究者(院生を含む)の人材育成に貢献しています。

EXODASSミニシンポジウム

アジア地域における研究拠点との連携

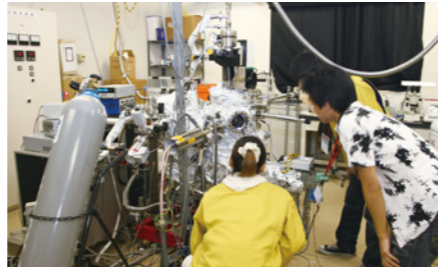
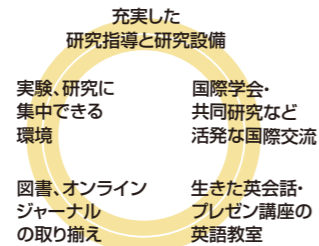
東アジア地域の研究機関との交流を積極的に推進するために、平成18~22年度には、日本学術振興会アジア研究教育拠点事業(JSPSアジアコア・プログラム)を実施しました。平成23年度からは研究所

独自の自主的事業「IMSアジアコア・プログラム」として、東アジア(特に中国、韓国、台湾)における分子科学の世界的研究教育拠点間の連携ならびに若手研究者の育成に努めています。

本研究は、分子科学における最先端の研究を推進するだけでなく、学生の教育を行い、明日の分子科学を担っていく人材を育成することにも力を入れています。

総合研究大学院大学

分子科学研究所は、総合研究大学院大学の物理科学研究科において構造分子科学専攻と機能分子科学専攻を担当し、次代を担う若手研究者の育成にも積極的に取り組んでおり、大学や民間で活躍する多くの卒業生を輩出しています。

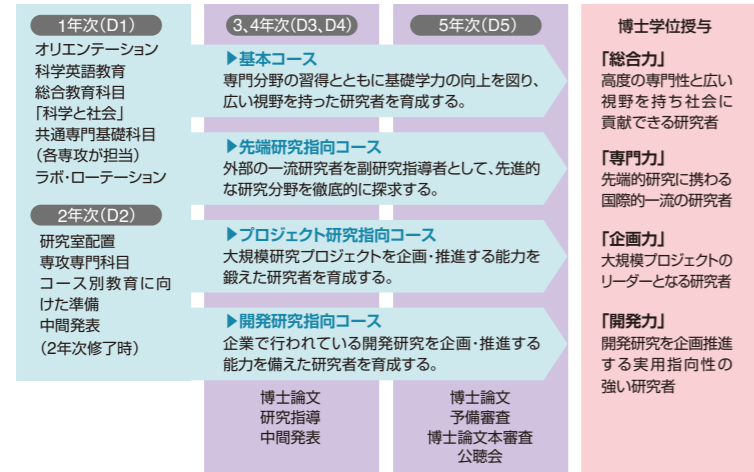


研究所で学ぶためには

分子科学研究所で学ぶためには、総合研究大学院大学の物理科学研究科・構造分子科学専攻もしくは機能分子科学専攻へ入学していただくことになります。

※すでに大学院に在籍している学生の方は「特別共同利用研究員」として分子研で学ぶことが出来ます。

【コース別大学院教育プログラム】



総合研究大学院大学とは？

総合研究大学院大学(総研大)は昭和63年に、全国の大学共同利用機関を基盤機関として、新しい理念と組織の下に創設された学部を持たない大学院のみの大学です。本部を神奈川県葉山町に置き、学生のみならず研究者自身の総合性と学際性を高めることを目指して、コース別教育プログラム、学生セミナー、国際シンポジウム、共同研究等々のユニークな活動を本部で行いつつ、平素の授業や研究活動は各基盤研究機関において行っています。



研究所を知るには

年間を通じて学生向けの催しを行っています。詳しくは分子研ホームページ <http://www.ims.ac.jp/> をご覧ください。

分子科学研究所オープンキャンパス
(5月31日)

夏の体験入学
(8月4日～8月7日)

大学院生のための公開講座
(夏季・冬季休業期間)

特別共同利用研究員

他の大学に所属している修士、博士の学生の方々に「特別共同利用研究員」として受入れ、研究指導を行っています。全国から毎年20名程度の学生の方々が分子研に滞在し、研究に取り組んでいます。

受入れ大学(過去10年)：北海道大学、茨城大学、宇都宮大学、千葉大学、東京大学、東京工業大学、新潟大学、信州大学、静岡大学、名古屋大学、愛知教育大学、名古屋工業大学、豊橋技術科学大学、北陸先端科学技術大学、京都大学、大阪大学、神戸大学、岡山大学、広島大学、愛媛大学、九州大学、名古屋国立大学、早稲田大学 他



支援制度

全年次の学生にRA(リサーチアシスタント)などによる経済的支援を行っています。また、分子科学研究所特別奨学生として、優秀な学生に対し奨学金を支給しています。

社会との連携



分子科学フォーラム

豊田理化学研究所との共催で"分子科学フォーラム"を年4回開催しています。国内外の著名な研究者を講師にお迎えし、分子科学をはじめとして様々な分野の研究をわかりやすく紹介して頂いています。

メディアによる情報発信

最新の研究成果や各種募集をホームページに掲載しています。また、分子研が発行している出版物についても、ホームページよりご覧いただけます。
<http://www.ims.ac.jp/indexj.html>

出前授業

学校では普段体験できないことを体験してもらい、科学に対する夢を持ってもらうために、主に岡崎市内の中学校を対象として、岡崎3研究所の研究者が講義・実験を行っています。



一般公開

研究所で行われている活動について、広く一般の方々に理解を深めていただくため、3年に1回一般公開を行っています。公開日(平成24年10月)は実験室の公開や講演会などの様々なイベントが行われました。



スーパーサイエンスハイスクール

文部科学省が指定した科学技術、理科・数学教育を重点的に行う高等学校(スーパーサイエンスハイスクール)活動を、自然科学研究機構として支援しています。

見学受入れ

研究所を多くの方にとって頂くため、見学の受入れを行っています。体験型展示室をはじめ、最先端の研究施設等を毎年たくさんの方に見学いただいています。



平成25年度は298人の見学者にお越しいただきました。

国研セミナー

岡崎市の科学技術・理科教育振興事業の一環として、岡崎3研究所と岡崎南ロータリークラブとの協力事業の一つとして行われているセミナーです。岡崎市内の小・中学校の理科教員を対象として、岡崎3研究所の研究者が講師となって昭和60年から始まり、毎年行われています。

岡崎市民大学講座

岡崎市教育委員会が、生涯学習の一環として岡崎市民を対象として開催しているもので、岡崎3研究所から講師を派遣しています。

自然科学研究機構 岡崎共通施設

岡崎情報図書館

<http://www.lib.orion.ac.jp/>
岡崎情報図書館は、岡崎3研究所の図書、雑誌等を収集・整理・保存し、機構の職員、共同利用研究者等が利用できます。

[主な機能]

◎情報検索サービス

Web of Science、SciFinder 等



岡崎共同利用研究者宿泊施設

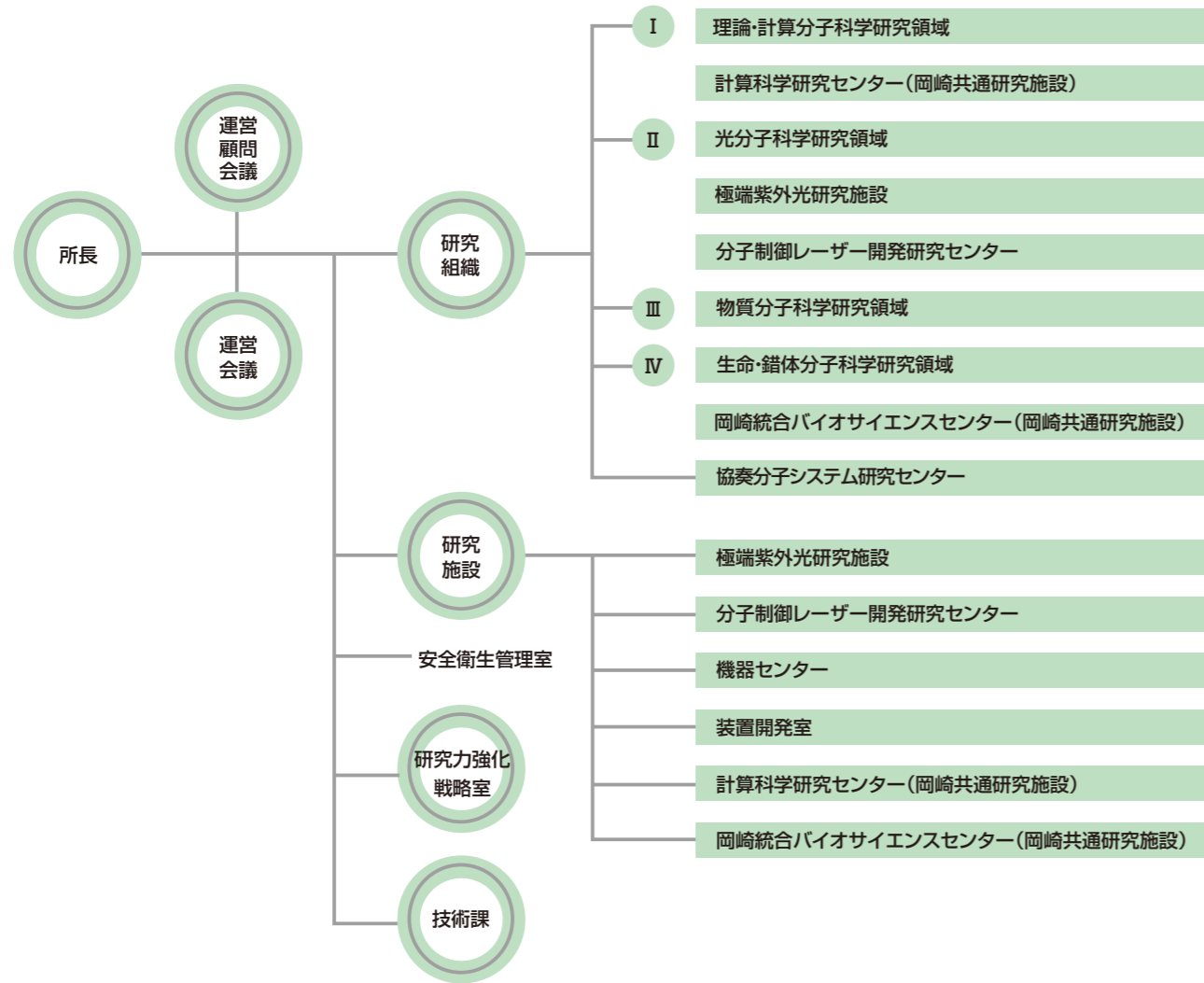
<http://www.orion.ac.jp/lodge/>
日本全国及び世界各国の大学や研究機関から共同利用研究等のために訪れる研究者のための宿泊施設として共同利用研究者宿泊施設(三島ロッジ、明大寺ロッジ)があります。



岡崎コンファレンスセンター

<http://www.orion.ac.jp/occ/>
学術の国際的及び国内的交流を回り、機構の研究、教育の進展に資するとともに、社会との連携、交流に寄与することを目的とした施設です。大会議室200名、中会議室120名、小会議室(2室)各50名の利用ができます。

組織図



研究体制

分子科学研究所の研究職員は研究領域あるいは研究施設に所属しています。技術課に属する技術職員は主に研究施設に配置されています。また、共同利用とは異なる安全衛生や広報などの活動は、平成16年度の法人化後、順次、専任職員を配置して、組織化しつつあります。さらに、同じく大学共同利用機関法人自然科学研究機構に属する基礎生物学研究所、生理学研究所とともに、岡崎キャンパス内に岡崎共通研究施設を設置しています。共通施設のうち、計算科学研究センターに属する3研究グループと岡崎統合バイオサイエンスセンターに属する4研究グループは、分子科学研究所に併任しており、大学共同利用機関分子科学研究所の一員として等しく大学等の研究者の共同研究・共同利用を推進・支援する体制をとっています。

沿革

昭和50年4月 分子科学研究所創設(昭和50年4月22日) 機器センター設置(～平成9年3月) 装置開発室設置	昭和59年4月 錯体化学実験施設設置(～平成19年3月)	平成14年4月 分子スケールナノサイエンスセンター設置(～平成25年3月)
昭和51年5月 化学試料室設置(～平成9年3月)	昭和63年10月 総合研究大学院大学 数物科学研究科 (～平成16年3月、以降は物理科学研究科)	平成16年4月 大学共同利用機関法人自然科学研究機構創設
昭和52年4月 電子計算機センター設置(～平成12年3月) 極低温センター設置(～平成9年3月)	平成9年4月 分子制御レーザー開発研究センター設置 分子物質開発研究センター設置(～平成14年3月)	平成19年4月 4研究領域に研究組織再編、機器センター再設置
昭和56年4月 岡崎国立共同研究機構創設(～平成16年3月)	平成12年4月 共通研究施設設置(岡崎統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター)	平成25年4月 協奏分子システム研究センター設置
昭和57年4月 極端紫外光実験施設設置		

運営

■顧問

研究所の研究、事業計画その他の管理運営に関して、所長の諮問に応じて助言等に当たります。外国人運営顧問に加えて、国内で運営顧問及び研究顧問を置いています。

[研究顧問]
柳田 敏雄(大阪大学大学院生命機構研究科教授)
Graham R. Fleming(米国カリフォルニア大学バークレー校教授)

[外国人運営顧問]
Ian A. Walmsley(英国オックスフォード大学副学長)
Thomas V. O'Halloran(ノースウェスタン大学教授)
[運営顧問]
齊藤 軍治(名城大学農学部教授)
廣田 襄(京都大学名誉教授)
増原 宏((台湾)国立交通大学理学院講座教授)

■運営会議

研究教育職員の人事、共同利用・共同研究等研究所の運営に関する重要事項で、所長が必要と認めるものについて所長の諮問に応じます。

[運営会議委員]○…議長 ○…副議長
朝倉 清高 北海道大学触媒化学研究センター教授
大西 洋 神戸大学大学院理学研究科教授
○神取 秀樹 名古屋工業大学大学院工学研究科教授
河野 裕彦 東北大学大学院理学研究科教授
鈴木 啓介 東京工業大学大学院理工学研究科教授
高田 彰二 京都大学大学院理学研究科教授
田原 太平 理化学研究所主任研究員
寺崎 亨 九州大学大学院理学研究院教授
水谷 泰久 大阪大学大学院理学研究科教授
森 初果 東京大学物性研究所教授

青野 重利 岡崎統合バイオサイエンスセンター教授
秋山 修志 協奏分子システム研究センター教授
魚住 泰広 生命・錯体分子科学研究領域教授
大島 康裕 光分子科学研究領域教授
大森 賢治 光分子科学研究領域教授
岡本 裕巳 光分子科学研究領域教授
加藤 晃一 岡崎統合バイオサイエンスセンター教授
○小杉 信博 光分子科学研究領域教授
齊藤 真司 理論・計算分子科学研究領域教授
山本 浩史 物質分子科学研究領域教授
横山 利彦 物質分子科学研究領域教授

運営会議に、次の人事選考部会及び共同研究専門委員会を置きます。

[人事選考部会]○…部会長
神取 秀樹(名工大教授)
田原 太平(理研主任研究員)
寺崎 亨(九大教授)
水谷 泰久(阪大院教授)
森 初果(物性研教授)

[共同研究専門委員会]○…委員長
大西 洋(神戸大院教授) 岡本 裕巳(分子研教授)
北川 宏(京大院教授) 小杉 信博(分子研教授)
高橋 聡(東北大院教授) 鈴木 敏泰(分子研准教授)
武田 信定(北大院教授) 信定 克幸(分子研准教授)
○青野 重利(統合バイオ教授) 古谷 祐詞(分子研准教授)
魚住 泰広(分子研教授)

■学会等連絡会議

所長の要請に基づき学会その他の学術団体等分子科学コミュニティとの連絡、運営会議、研究施設運営委員会委員候補者等の推薦等に関することについて検討し、意見を述べます。

大場 正昭(九大院教授) 田原 太平(理研主任研究員)
加藤 昌子(北大院教授) 寺嶋 正秀(京大院教授)
金谷 利治(京大教授) 中嶋 敦(慶応大教授)
神取 秀樹(名工大院教授) 松原英一郎(京大院教授)
小林 昭子(日大教授) 松本 吉泰(京大院教授)
関谷 博(九大院教授) 吉澤 一成(九大教授)
高塚 和夫(東大院教授) 吉信 淳(東大教授)

秋山 修志(分子研教授)
魚住 泰広(分子研教授)
小杉 信博(分子研教授)
齊藤 真司(分子研教授)
横山 利彦(分子研教授)

■教授会議

専任・兼任・併任・客員の教授及び准教授で構成し、研究及び運営に関する事項について所長を補佐します。

中期計画

文部科学大臣から提示された平成22年度から平成27年度までの第2期中期目標に対して、自然科学研究機構として第2期中期計画を立てました。中期計画を着実に実行するために毎年、年度計画を立て、年度終了後、実績報告書を文部科学省に提出することになっています。分子科学研究所は研究者個人の自由な発想に基づく基礎学術研究を中心に据えた研究所です。研究の神髄は計画通りに行かない意外性にあります。そのため、分子科学研究を支えている種々の研究設備も、限定した目的のためのものではなく、学問の多様性に対応できるものになっています。以下は、このような背景で立案した分子科学の研究分野の中期計画(抜粋)です。

- 分子科学分野において、物質・材料の基本となる分子及び分子集合体の構造、機能、反応に関して、原子・分子及び電子のレベルで究明します。それによって、化学現象の法則を発見、一般化して新たな現象や機能を予測、実現します。
- (1)分子物性や化学反応の制御、複雑な系の電子状態や構造の動的変化、生体分子の構造揺らぎと分子認識などに関して理論的に研究します。
 - (2)X線からテラヘルツ領域の特徴ある光源を開発します。それらを利用して、分子の励起状態変化の追跡や化学反応のコヒーレント制御の研究を進めます。
 - (3)機能性有機化合物、分子性触媒、炭素ナノ構造体など新規な分子系を開発します。併せて、分子分光法などを駆使して新規な分子物性を探索します。
 - (4)化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換や水を使った高効率な分子変換の実現を目指します。生体分子に特徴的な現象や機能の原因も究明します。

人員・予算

人員 (平成26年4月1日現在)							平成25年度決算額		平成25年度外部資金受入状況*1		
区分	所長	教授	准教授	助教	小計	技術職員	合計	区分	決算額	区分	合計
所長	1	—	—	—	1	—	1	人件費	1,068,438	科学研究費助成事業等*2	207,349
研究領域	—	12(8)	8(6)	34	54(14)	—	54(14)	運営費設備費	2,766,019	共同研究	81,536
研究施設	—	4	9	13	26	—	26	施設費	322,686	戦略的創造研究推進事業等(JST)	231,892
技術課	—	—	—	—	—	34(1)	34(1)	合計	4,157,143	科学技術振興調整費等(文科省)	739,379
合計	1	16(8)	17(6)	47	81(14)	34(1)	115(15)		(単位:千円)	その他	289,744
										小計	1,261,015
										合計	1,549,900

※()内は客員及び兼任の合計で外数。※年俸制職員及び機構内併任は現員数に含む。
※休職者は現員数に含む。

*1 左記決算額に含む。 *2 間接経費を含む。
*3 受託事業及び間接経費を含む。共通研究施設を除く。