

## 理論分子科学第二研究部門

石 崎 章 仁 (教授) (2016 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：理論物理化学

A-2) 研究課題：

- a) AMO 物理学に基づく分子系の観測と制御の理論研究
- b) 量子散逸系のダイナミクス理論に基づく凝縮相分子系における反応過程の理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 近年、冷却原子系の分野を中心に Floquet Engineering と呼ばれる考え方が注目を集めている。Floquet Engineering では、注目する系を外部から周期的に駆動することで制御し、望みのハミルトニアンや量子状態を実現し、未開の物理を探索するための舞台を与えている。本研究課題では、Floquet Engineering の枠組を凝縮相分子系におけるエネルギー移動や電荷移動など散逸系の量子ダイナミクス現象に適用し、Floquet Engineering を用いて分子間のエネルギー移動や電荷移動を操作し得ることを見出した。理論解析と数値解析により、凝縮相のような散逸や揺らぎに曝された量子系においても Floquet Engineering は頑健に機能することを明らかにした。
- b) 近年の分光実験により、緑色植物等の光化学系 II (PSII) 反応中心における初期電荷分離は数百フェムト秒の時間スケールで起こることが示唆されているが、これは比較的良好に理解されている紅色細菌の反応中心に比べて約 10 倍も速い。本研究課題では、タンパク質の構造・色素の配置に関する小さな差異と光化学系 II の超高速電荷分離反応の実現の関係性について研究を進めている。最近の二次元電子分光データは色素の分子内振動が PSII の電荷分離を促進する可能性を示唆しているが、電荷分離状態は光学禁制であるため詳細な情報を分光学的に得ることは容易ではない。我々は分子シミュレーションの助けを借りながら、分子内振動モードによる PSII 電荷分離への影響を量子ダイナミクス計算と分光スペクトルのモデリングに基づいて解析を進めている。

また、有機薄膜太陽電池はフレキシブルかつ低コストのエネルギー源として期待されている一方で、そのエネルギー変換効率は 10% 程度にとどまり実用化には更なる改善が必要である。有機物質では、その低誘電率のため室温の熱エネルギーよりも遥かに大きな電子・正孔の強束縛状態からの電荷分離過程が含まれており、その詳しい機構は未だ明らかではない。本研究課題では、有機物質における電子フォノン相互作用によるポーラロン形成および量子コヒーレンスとそのデコヒーレンスとの競合に着目し、ポーラロンの形成過程を正しく記述する量子ダイナミクス計算を行った。その結果、ポーラロン形成がコヒーレントな超高速電荷分離過程からインコヒーレントな電荷再結合過程への遷移を引き起こし、これにより電荷再結合を遅らせることで電荷分離状態が長時間維持され得ることを明らかにした。

B-1) 学術論文

**Y. FUJHASHI, L. CHEN, A. ISHIZAKI, J. WANG and Y. ZHAO**, "Effect of High-Frequency Modes on Singlet Fission Dynamics," *J. Chem. Phys.* **146**, 044101 (11 pages) (2017).

B-3) 総説, 著書

G. D. SCHOLES, G. R. FLEMING, L. X. CHEN, A. ASPURU-GUZI, A. BUCHLEITNER, D. F. COKER, G. S. ENGEL, R. VAN GRONDELLE, A. ISHIZAKI, D. M. JONAS, J. S. LUNDEEN, J. K. MCCUSKER, S. MUKAMEL, J. P. OGILVIE, A. OLAYA-CASTRO, M. A. RATNER, F. C. SPANO, K. B. WHALEY and X. Y. ZHU, "Using Coherence to Enhance Function in Chemical and Biophysical Systems," *Nature* **543**, 647–656 (2017).

B-4) 招待講演

石崎章仁,「HFSP 2017年若手研究 Grant」, 2017年度生命科学系学会合同年次大会 AMED フォーラム～HFSP 国際 Grant トへの招待～, 神戸ポートピアホテル, 兵庫県神戸市, 2017年12月.

石崎章仁,「量子散逸系として見る光合成光捕集系」, 2017年度生命科学系学会合同年次大会, 神戸ポートピアホテル, 兵庫県神戸市, 2017年12月.

A. ISHIZAKI, "Quantum dynamical aspects in biophysical and material systems," 1<sup>st</sup> QST International Symposium "Quantum Life Science," Tokyo Bay Makuhari Hall, Makuhari (Japan), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," University of Leeds, Leeds (U.K.), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," University of Manchester, Manchester (U.K.), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," University College London, London (U.K.), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," University of Oxford, Oxford (U.K.), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart (Germany), July 2017.

石崎章仁,「多光子分光法の可能性——量子もつれ分光法は可能か——」, 第14回 AMO 討論会, 東京電気通信大学, 東京都府中市, 2017年6月.

石崎章仁,「光合成初期過程は量子力学を巧みに利用している? ～理論家の隙間産業研究～」, すぐには役に立たない!? 研究講座～自然の力でもものづくり～, 科学技術振興機構東京本部別館, 東京都千代田区, 2017年6月.

石崎章仁,「量子散逸系の動力学理論とその化学・生物物理ダイナミクスへの展開」, 第271回分子工学コロキウム, 京都大学, 京都府京都市, 2017年5月.

石崎章仁,「量子散逸系のダイナミクス理論とその光合成初期過程への展開」, 理化学研究所「物質階層原理研究」第1回春期研究会, 御殿場高原ホテル, 静岡県御殿場市, 2017年5月.

石崎章仁,「凝縮相量子ダイナミクスの理論とその光合成初期過程への展開」, 近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会(第98回例会), 大阪科学技術センター, 大阪府大阪市, 2017年2月.

石崎章仁,「Sir Martin Wood Prize Lecture: 実時間量子散逸系理論の開発とその分子系励起ダイナミクスへの展開」, 東京大学, 東京都文京区, 2017年1月.

B-6) 受賞, 表彰

石崎章仁, 平成 29 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞 (2017).

**G. SCHLAU-COHEN, A. ISHIZAKI and M. JOHNSON**, Young Investigator Grant 2017 from Human Frontier Science Program (2017).

石崎章仁, 第 18 回サー・マーティン・ウッド賞 (2016).

**A. ISHIZAKI**, The Best Article Award 2016 of Journal of the Chinese Chemical Society (2016).

石崎章仁, 第 10 回凝縮系科学賞 (2015).

石崎章仁, 日本物理学会第 10 回若手奨励賞 (2015).

**A. ISHIZAKI**, Short-term Fellowship at Wissenschaftskolleg zu Berlin (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域 12 領域運営委員 (2017).

日本化学会東海支部常任幹事 (2017).

学会の組織委員等

The 1<sup>st</sup> QST International Symposium プログラム委員 (2016–2017).

The 45<sup>th</sup> World Chemistry Congress of the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC-2015) 組織委員・物理化学 (2015).

第 3 回 NINS Colloquium 「自然科学の将来像」運営組織委員 (2014).

NTU-IMS Faculty Exchange Meeting 世話人 (2014).

第 22 回化学ソルベール会議, scientific secretary (2010).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省科学技術・学術政策研究所科学技術動向研究センター専門調査員 (2015–).

その他

The Netherlands Foundation for Fundamental Research on Matter, external reviewer (2013, 2015).

Research Grant Council of Hong Kong, external reviewer (2012).

B-8) 大学での講義, 客員

理化学研究所環境資源科学研究センター生体機能触媒研究チーム, 客員研究員, 2016 年 5 月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「光合成初期過程の効率性と恒常性を制御する電荷分離・再結合反応の理論研究」, 石崎章仁 (2017 年–2021 年).

Human Frontier Science Program, Young Investigator Grant 2017 “Regulation of photosynthetic light harvesting: how does protein conformation control photophysics?” G. Schlau-Cohen, A. Ishizaki and M. Johnson (2017 年–2020 年).

科研費若手研究(A), 「光合成光捕獲系における電子エネルギー移動ダイナミクスとその環境適応性の分子理論」, 石崎章仁 (2013 年–2017 年).

科研費研究活動スタート支援,「光合成エネルギー移動ダイナミクスを制御するタンパク質構造の揺らぎと変化について」,石崎章仁(2012年–2013年).

日本学術振興会海外特別研究員事業,「光合成複合体における超高速エネルギー移動の量子力学的機構の解明」,石崎章仁(2008年–2010年).

科研費特別研究員奨励費,「超高速非線形分光による凝縮相中分子および分子集合体の量子動力学の理論的解析」,石崎章仁(2006年–2008年).

#### C) 研究活動の課題と展望

近年,生体系や有機物質系における電荷及びエネルギー移動において,その量子性が移動効率の最適化に関して重要であることが理論的及び実験的に指摘されてきている。これらの動力的過程の性質を十分に明らかにすることは自然に対する理解を深めるだけでなく,微小系の作成及び制御技術の飛躍的進歩と相まり,最適な人工デバイス設計に対する指針を与えるうえでも重要である。従って,分子系の量子性と環境の熱揺らぎを適切に取り扱うことは必要不可欠であるが,これらの領域はまた様々な非自明かつ魅力的な物理現象が生じる舞台となることも明らかになってきている。我々は,これらの非自明的な物理現象が,着目している分子系での電荷,エネルギー,及び熱移動のような動力的過程において本質的役割を果たす可能性を考慮しつつ,様々な素過程の役割を明らかにし,物理現象に対する明瞭かつ本質的理解を深めることを目指したい。