

## 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) 量子散逸系の動力学理論に基づく凝縮相分子系における動的過程の理論研究
- b) 光・量子科学技術に基づく複雑分子系の観測と制御の理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ヘリカル構造を持つ分子系はスピン状態に依存した電荷輸送を示すことが報告されており、カイラル誘起スピン選択 (CISS) 効果として注目を集めている。しかし、スピン選択性の起源および詳細なスピン輸送機構に関して理解が不十分なままである。特に、分子系に付随するどのような要素がスピン選択性に影響を与えるかを明らかにすることは、今後の分子スピントロニクス発展のために不可欠である。本研究課題では、量子コヒーレント伝導および分子性環境由来の古典ホッピング伝導の両過程の統一的取扱いを行うことで、CISS 効果の機構の理解を目的とした理論研究を推し進めている。特に実験で観測されているスピン分極の分子長及び温度依存性と整合性を持つよう理論解析を進めている。

緑色植物の光化学系 II (PSII) 反応中心は紅色細菌の反応中心と類似の色素配置を持つが、PSII 反応中心の初期電荷分離過程は比較的よく理解されている紅色細菌のそれとは大きく異なることがこの 20 年で明らかになってきた。本研究課題では、初期電荷分離過程における色素分子の分子内振動とタンパク質環境の影響およびそれらの競合に着目し、PSII の電荷分離の様態とそれに関与する色素分子の構造の関係性について量子動力学理論と量子化学計算を組み合わせることにより解析した。重要な成果の一つとして、全ての振動モードの寄与を考慮した場合には PSII の電荷分離速度に対するエネルギーギャップ依存性や温度依存性が見られなくなることを明らかにした。これは、PSII の電荷分離過程がタンパク質環境や外界変動に対して持つ頑健性を示唆している。

- b) 天然光合成では太陽光光子を吸収することで種々の動的過程が引き起こされるが、光子統計など太陽光の性質は実験で用いられるレーザー光のそれとは大きく異なる。本研究課題では、太陽光を模倣する擬サーマル光源として「時間-周波数量子もつれ光子対」を用いた新規分光計測法について研究を進めている。時間-周波数量子もつれ光子対は自発的パラメトリック下方変換 (SPDC) で生成されるが、光子対の一方を観測しない場合、他方の光子状態は熱放射と類似の量子状態・光子統計を示す。現在、光合成色素タンパク質複合体が吸収する可視光の周波数領域で、SPDC による周波数量子もつれ光子対が太陽光すなわち温度 6000 K の黒体輻射の性質、また、物質との相互作用をどの程度まで模倣できるのかを量子光学および量子動力学の理論に基づいて解析を進めている。

冷却原子系分野を中心に注目を集める Floquet Engineering 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未開の物理を探索するための舞台を与える。本年度は、複数サイトから成る分子ネットワークにおける量子ダイナミクスではサイト間相互作用に伴う位相つまり Peierls 位相が重要な制御パラメータとなり得ることに着目し、Floquet Engineering を用いて Peierls 位相を制御し得ることを示した。さらに、分子ループ構造における電荷輸送を取り上げ、ループが持つべき Chiral 対称性が自発的に破られること、その帰結として外部電圧なしで流れる電流の誘起され得ることを示した。

B-1) 学術論文

**Y. FUJIIHASHI, M. HIGASHI and A. ISHIZAKI**, “Intramolecular Vibrations Complement the Robustness of Primary Charge Separation in a Dimer Model of the Photosystem II Reaction Center,” *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 4921–4929 (2018).

**A. KATO and A. ISHIZAKI**, “Non-Markovian Quantum-Classical Ratchet for Ultrafast Long-Range Electron–Hole Separation in Condensed Phases,” *Phys. Rev. Lett.* **121**, 026001 (5 pages) (2018).

**N. T. PHUC and A. ISHIZAKI**, “Control of Excitation Energy Transfer in Condensed Phase Molecular Systems by Floquet Engineering,” *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 1243–1248 (2018).

B-4) 招待講演

**A. ISHIZAKI**, “Photophysical quantum dynamics of light harvesting processes in photosynthetic and photovoltaic systems,” 10<sup>th</sup> Asian Photochemistry Conference, Howard Civil Service International House, Taipei (Taiwan), December 2018.

石崎章仁, 「量子散逸系として見る光合成光捕集におけるダイナミクス」, 応用物理学会量子エレクトロニクス研究会, 上智大学軽井沢セミナーハウス, 長野県北佐久郡, 2018年12月.

石崎章仁, 「HFSP2017若手研究者グラント」, HFSP説明会, 熊本大学, 熊本県熊本市, 2018年10月.

石崎章仁, 「Intramolecular vibrations complement robustness of the primary charge separation in Photosystem II reaction center」, 第56回日本生物物理学会年会, 岡山大学, 岡山県岡山市, 2018年9月.

石崎章仁, 「量子散逸系としてみる光捕集系: PSII反応中心における初期電荷分離, 有機太陽電池における電荷再結合」, 2018年光化学討論会, 関西学院大学, 兵庫県西宮市, 2018年9月.

**A. ISHIZAKI**, “Molecular encryption and processing of information,” 第14回日独先端科学シンポジウム, 京都ブライトンホテル, 京都府京都市, 2018年9月.

石崎章仁, 「量子散逸系としてみる光捕集系におけるエネルギー移動・電荷分離反応」, 第58回生物物理若手の会夏の学校, 岐阜県岐阜市, 2018年8月.

**A. ISHIZAKI**, “Effects of dephasing upon quantum dynamical phenomena in condensed phase molecular processes,” Workshop on quantum effects in biological systems, Vilnius (Lithuania), July 2018.

石崎章仁, 「量子開放系として見る光合成光捕集系: ダイナミクスと光学応答」, 量子科学技術研究開発機構高崎量子応用研究所セミナー, 高崎量子応用研究所, 茨城県那珂郡東海村, 2018年3月.

石崎章仁, 「量子開放系として見る光合成光捕集系: ダイナミクスと光学応答」, 一般社団法人レーザー学会学術講演会第38回年次大会, 京都市勧業館みやこメッセ, 京都府左京区, 2018年1月.

石崎章仁, 「量子散逸系としてみる光捕集系におけるエネルギー移動・電荷分離」, 「革新的光物質変換」第1回公開シンポジウム, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2018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 (2017–2018).

日本化学会東海支部常任幹事 (2017–2018).

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

東京理科大学理学部第二部, 「生命を支える光—光合成の物理と化学—」, 2018年9月29日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「理論化学(後半, 統計力学)」, 2018年7月5日–6日.

#### 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, M. Johnson and A. Ishizaki (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的理論的解析」, 石崎章仁 (2006年–2008年).

### C) 研究活動の課題と展望

生体及び有機物質系における励起子及び電荷移動などの動力学過程は、周囲の溶媒、タンパク質、分子の核運動等の影響を受けることによって多様かつ頑健な機能を生み出しており、その全容を明晰に理解することは物理学の最も魅力的な問題の一つである。このような複雑な相互作用により生ずる非自明な機能を理解するためには、各動力学過程における様々な要素の適切な理論的取り扱いが必要である。我々は、量子散逸系のダイナミクス理論を用い、または新たに発展させ、複雑な分子系における物理現象の本質的かつ簡明な理解を得ることを目指している。また同時に、最新の量子科学技術を適用することで、従来技術と比較してより詳細な分子系の情報を得ることが可能な手法の開発に向けて研究を続けている。