

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指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。

- b) 例えば光化学系 II 反応中心における初期電荷分離反応では、熱揺らぎ程度のエネルギー領域に複数の電子状態が存在する。しかし、既存の時間分解レーザー分光法では周波数分解能と時間分解能は Fourier 共役のトレードオフ関係にあり、その動的過程の実時間観測は困難なことが多い。本研究課題では、複雑分子系における分光学的研究への応用を念頭に、量子もつれ光を光源とする時間分解分光法の理論の構築を試みている。もつれ光子対の量子相関を利用することによりレーザーパルスなど古典光では不可能な周波数分解能と時間分解能の両立が可能となるような非線形光学応答関数の Liouville 経路を見出し、現在、分光シグナルの定式化を進めている。

さらに微小光共振器に閉じ込められた光と分子の相互作用を用いた分子系の観測と制御の理論研究も展開している。凝縮相における分子の電子励起エネルギーは気相の値から大きく変わり、また、量子ダイナミクスや化学反応ダイナミクスに大きな影響を与える。しかし、分子環境との相互作用による分光スペクトルのブロードニングのため凝縮相分子の電子励起エネルギーを正確に測定することは困難を極める。本年度は、分子系を微小光共振器に閉じ込められた光と強く結合させることにより生成される分子ポラリトンに着目し、凝縮相分子の電子励起エネルギーを正確に測定し得る手法を提案した。更に、分子ポラリトンに対する熱揺らぎの影響を調べることにより、分子ポラリトンのピーク幅と分子数を結ぶ指数スケールリングを導いた。この指数は分子環境のダイナミクスに関する情報を与えることを明らかにした。

B-1) 学術論文

T. P. NGUYEN and A. ISHIZAKI, "Precise Determination of Excitation Energies in Condensed-Phase Molecular Systems Based on Exciton-Polariton Measurements," *Phys. Rev. Research* **1**, 033019 (9 pages) (2019).

T. P. NGUYEN and A. ISHIZAKI, "Control of Quantum Dynamics of Electron Transfer in Molecular Loop Structures: Spontaneous Breaking of Chiral Symmetry under Strong Decoherence," *Phys. Rev. B* **99**, 064301 (9 pages) (2019).

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI, “Effects of dephasing upon quantum dynamical phenomena in condensed phase molecular processes,” Materials Research Meeting 2019 Materials Innovation for Sustainable Development Goals, Yokohama (Japan), December 2019.

A. ISHIZAKI, “Generation of pseudo-sunlight via quantum entangled photons and the interaction with molecules,” Department of Physics, University of Warwick, Coventry (U.K.), November 2019.

A. ISHIZAKI, “Intramolecular vibrations complement the robustness of primary charge separation in the photosystem II reaction center,” The 3rd International Solar Fuels Conference/International Conference on Artificial Photosynthesis-2019, Hiroshima (Japan), November 2019.

A. ISHIZAKI, “Generation of pseudo-sunlight via quantum entangled photons and the interaction with molecules,” Workshop on Biological Sensing and its Application, Keio University, Tokyo (Japan), October 2019.

Y. FUJHASHI and A. ISHIZAKI, “Intramolecular vibrations complement the robustness of primary charge separation in the photosystem II reaction center,” BIRS Workshop Charge and Energy Transfer Processes: Open Problems in Open Quantum Systems (19w5016), Alberta (Canada), August 2019.

石崎章仁, 「量子と古典のはざままで——分子系における量子散逸系とそのダイナミクス」, 東京大学先進科学研究機構, 東京都目黒区, 2019年7月.

A. ISHIZAKI, “Effects of dephasing upon quantum dynamical phenomena in condensed phase molecular processes,” the 23rd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Chiang Mai University, Chiang Mai (Thailand), June 2019.

A. ISHIZAKI, “Generation of pseudo-sunlight via quantum entangled photons and the interaction with molecules,” Workshop on Quantum Noise and Quantum Environments, RIKEN, Wako (Japan), June 2019.

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

日本学術振興会第 3 回日英先端科学シンポジウム企画委員 (2019).

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

The 45th 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-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきかけ研究「量子技術を適用した生命科学基盤の創出」領域, 「時間分解量子もつれ分光法: 理論基盤の構築と生体分子系への応用」, 藤橋裕太 (2019年-2023年).

科研費若手研究, 「Theoretical study of nonlinear optical responses of ultracold atomic systems: towards a high-resolution coherent multidimensional spectroscopy investigation of quantum many-body effects」, NGUYEN, Thanh Phuc (2019年-2022年).

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).

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進めている。