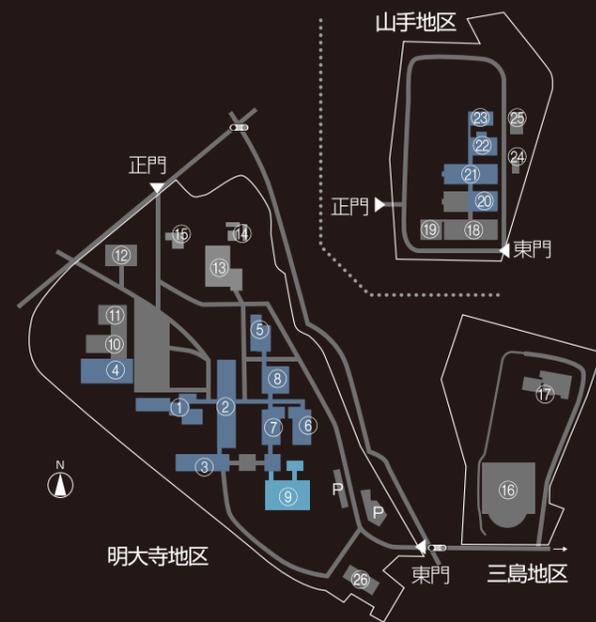


大学共同利用機関法人 自然科学研究機構

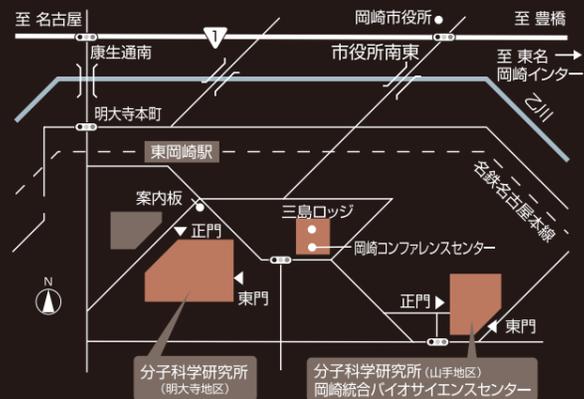
分子科学研究所

所内案内



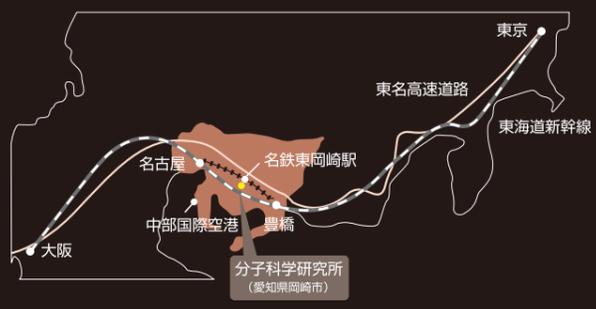
施設	面積 m ²
① 研究棟	2,752
② 実験棟	8,857
③ 南実験棟	3,935
④ 計算科学研究センター棟	2,474
⑤ 極低温棟	1,527
⑥ 化学試料棟	1,063
⑦ レーザーセンサー棟	1,053
⑧ 装置開発棟	1,260
⑨ 極端紫外光実験棟	3,097
⑩ 事務センター棟	2,371
⑪ 図書館	2,002
⑫ 職員会館	1,575
⑬ エネルギーセンター	1,255
⑭ 廃棄物貯蔵庫	60
⑮ 警備員室	74
⑯ 岡崎コンファレンスセンター	2,863
⑰ 三島ロッジ	4,079
⑱ 山手1号館A	4,674
⑲ 山手1号館B	2,303
⑲ 山手2号館	8,453
⑲ 山手3号館	10,757
⑲ 山手4号館	3,813
⑲ 山手5号館	664
⑳ 実験排水処理施設	111
㉑ 高圧配電施設	440
㉒ 明大寺ロッジ	1,023

アクセス



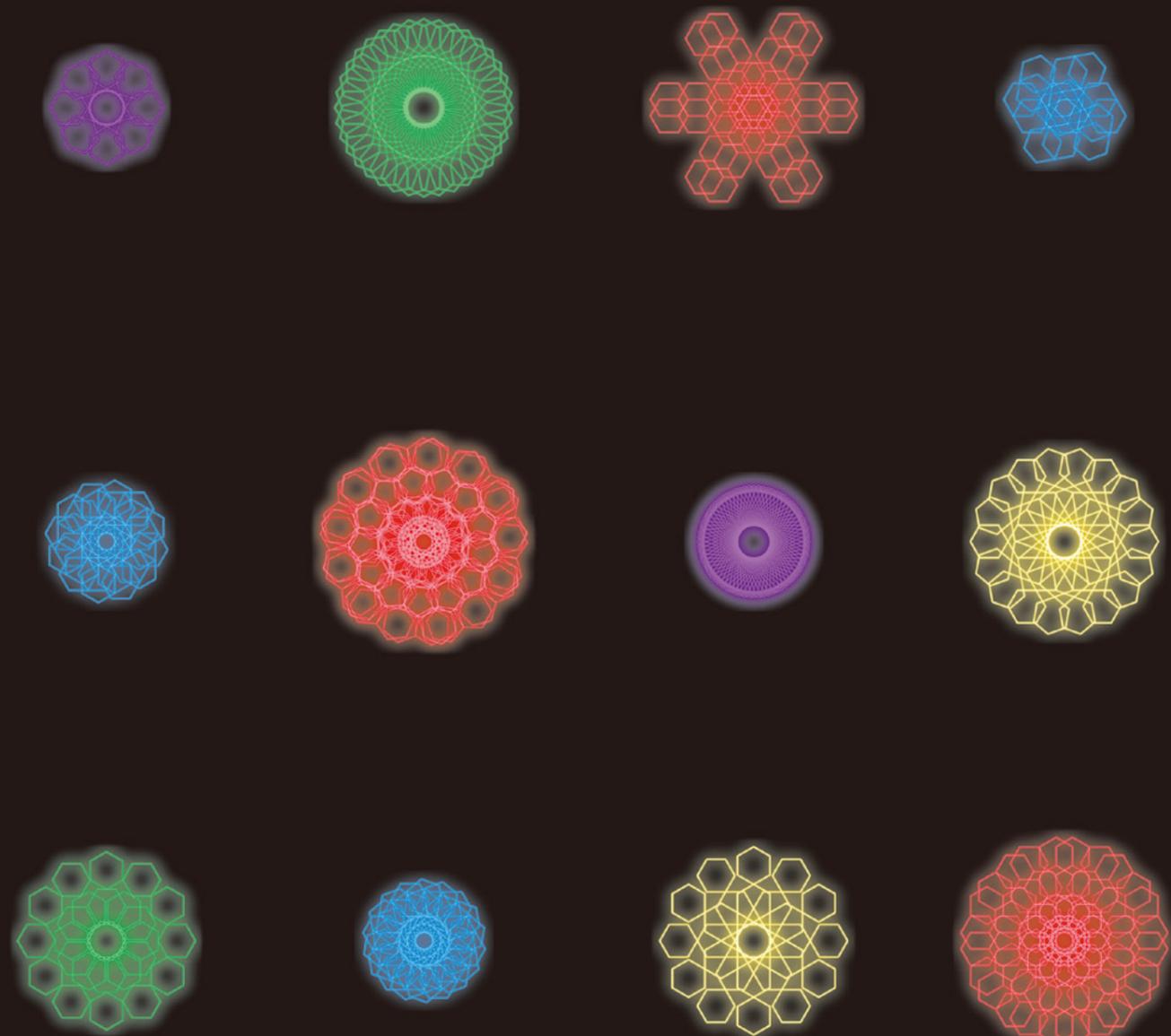
■ 東京方面から
豊橋駅下車、名鉄(名古屋鉄道)に乗り換えて、東岡崎駅下車(豊橋—東岡崎間約20分)、南口より徒歩約7分。

■ 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岡崎駅行に乗り、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。



限りなき分子の謎に挑み 分子の可能性を広げ続けます

分子科学研究所は、物質の基礎である分子の構造とその機能に関する実験的研究並びに理論的研究を行うとともに、化学と物理学の境界にある分子科学の研究を推進するための中核として、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。物質観の基礎を培う研究機関として広く物質科学の諸分野に共通の知識と方法論を提供することを意図しています。限られた資源のなかで、生産と消費の上に成り立つ物質文明が健全に保持されるためには、諸物質の機能を深く理解し、その正しい利用を図るのみでなく、さらに進んで物質循環の原理を取り入れなければなりません。分子科学研究所が対象とする分子の形成と変化に関する原理、分子と光との相互作用、分子を通じて行われるエネルギー変換の機構等に関する研究は、いずれも物質循環の原理に立つ新しい科学・技術の開発に貢献するものであります。



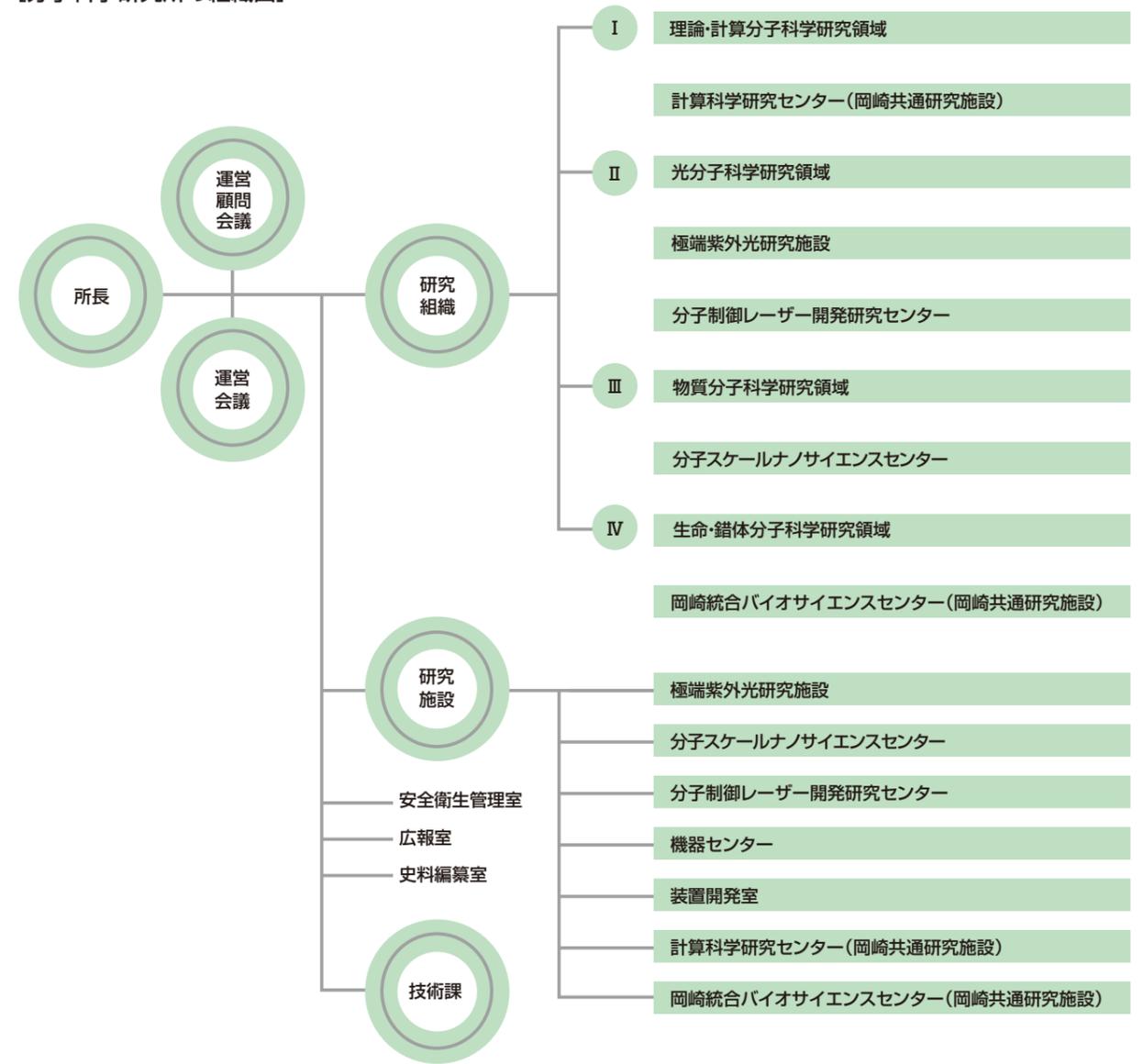
分子科学は、分子と対話し、分子がつくりだす多様な自然の現象の源を探り、またその知識を基に新しい物質機能を創出しようとする学問であり、その対象は個々の分子から生命・宇宙現象の非常に広い範囲にわたります。分子科学研究所は、そのような分子科学の研究の中核拠点として実験的研究および理論的研究を行うとともに、広く研究者の共同利用に供することを目的として設立された大学共同利用機関です。分子科学研究所は創設以来35年余、多くの画期的な研究を行い、また物理・化学研究を支える人材を輩出し、日本のみならず世界のトップインスティテュートとして、分子科学研究の振興をおこなってきました。

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。

一方、科学研究はミ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。ミクロとマクロの間にある、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。このような階層性の高い分子過程の解明にチャレンジすることは、大きな学術的意味のみならず、エネルギー問題、環境問題、情報技術にも革新的な波及効果を与え得るものであり、これから分子科学研究所の重要な研究領域としていきたいと考えています。

平成23年4月
自然科学研究機構・分子科学研究所
所長 大峯 巖

【分子科学研究所の組織図】



●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51年5月
化学試料室設置(～平成9年3月)
- 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)
- 昭和56年4月
岡崎国立共同研究機構創設(～平成16年3月)
- 昭和57年4月
極端紫外光実験施設設置
- 昭和59年4月
錯体化学実験施設設置(～平成19年3月)
- 昭和63年10月
総合研究大学院大学開学
数物科学研究科(～平成16年3月、以降は物理学研究科)
構造分子科学専攻、機能分子科学専攻
- 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12年4月
共通研究施設設置(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16年4月
大学共同利用機関法人自然科学研究機構創設
- 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

分子科学研究所の研究分野は、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大分野に大別され、それぞれにおいて、教授もしくは准教授の独立した研究グループが、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、最先端の施設を利用した共同研究の場を国内外の多数の研究者へ提供し、また、東アジア地域の研究拠点と密接な研究協力ネットワークを形成するなど、世界規模での分子科学の振興に力を尽くしています。

理論・計算分子科学研究領域

見えない複雑な分子を描き出す
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。

光分子科学研究領域

光を造る、光で観る、光で制御する
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。

物質分子科学研究領域

物質創成、機能制御、新しい観測手法の開発
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。

生命・錯体分子科学研究領域

生体機能の実現と無駄のない化学反応へ
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



永瀬 茂(教授)

1969年大阪大学卒業、1975年同大学院博士課程修了、ロチェスター大学博士研究員、オハイオ州立大学博士研究員、分子科学研究所技官を経て、1980年横浜国立大学助教授、1991年同教授、1995年東京都立大学教授、1997年同大学院教授、2001年4月より現職。
TEL: 0564-55-7300
FAX: 0564-53-4660
mail:nagase@ims.ac.jp

〈キーワード〉

分子設計

反応設計

理論と計算法の開発

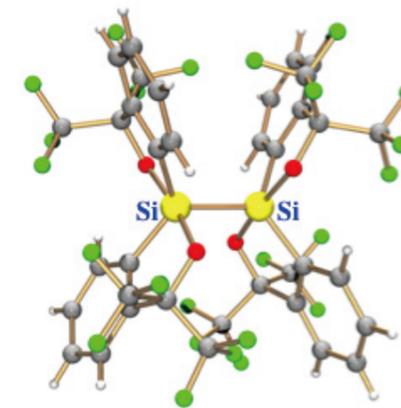
コンピュータシミュレーション

理論分子科学第一研究部門 分子の設計と反応の理論と計算

環境に優しい有用な物質を合理的に設計し反応も高度に制御することは、物質科学の中心課題ですが、これまでは試行錯誤的な方法に頼ることが相応に大きかったといえます。化学の限らない夢は、物質を分子の電子レベルで統一的に理解し、「望む構造、物性、機能をもつ分子やクラスターを自由にデザインして組み立て、思うがままに反応させる」ことです。この実現のための理論と計算法の開発およびコンピュータシミュレーションを行っています。また、内外の実験グループと密に連携し実際の合成の可能性と予測した特性の実証を行っています。

周期表には利用できる元素は約80種類もあり、これらの複合的な組み合わせは、多様な機能電子系発現の宝庫であり無限の可能性を秘めています。最近の大きな関心は、限られた元素だけではなくすべての元素の特性を上手く利用して、目的とする分子を設計したり反応させたりすることにあります。しかし、これまでの結合則と反応則の多くは、第2周期元素を中心に確立されてきたので、高周期の元素にも同じように適用できないことが多いのです。これらを各元素や分子ごとに個別に議論するのではなく、見かけ上異なる現象をできるだけ統一的な視点から理解し、すべての元素に広く適用できる簡便な理論設計の確立を目指しています。

分子の特性は、元素の組み合わせばかりでなく、立体的な形とサイズおよび柔軟さによって大きく



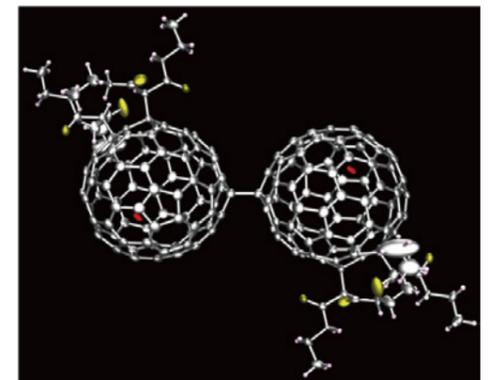
5配位ケイ素間に安定な結合をもつ分子。

変化します。サイズの大きい分子には、新規な構造、物性、機能が数多く隠されています。これらは、構成する原子数が同じでも、さまざまな構造をとることができるので、電子、光、磁気特性ばかりでなく、ゲスト分子との相互作用と取り込み様式も大きく変化します。これらの骨格に異種の原子を加えると、変化のバリエーションを飛躍的に増大させることもできます。また、形状や空孔のサイズを適度に変えることにより、機能性の高い超分子を構築できます。

現在、無数の分子が合成の挑戦を待ち受けています。しかし、組み立てた分子を現実化するには、前駆体や置換基の適切で厳密な選択ばかりでなく、反応経路と反応条件の微妙な設定も要求されます。したがって、分子構築から合成実現までを目的としています。このとき、望みの機能をいかに発現させるかは特に重要です。分子単独の設計ばかりでなく、幾つかの分子ユニットが自己集成的に組織化する系の設計と合成も自由にできることを夢んでいます。

参考文献

- 1) 永瀬茂、平尾公彦、「分子理論の展開」、現代化学への入門17、岩波書店(2002)。
- 2) T. Akasaka, F. Wudl, and S. Nagase, Eds., "Chemistry of Nanocarbons," John Wiley; London (2010)。



化学修飾による金属内包フララーレンの機能化。



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

〈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

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

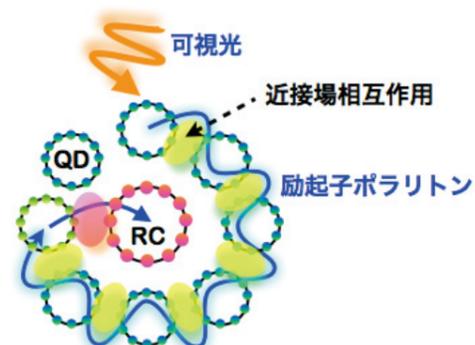
光(電磁場)と物質の相互作用は非常に多くの研究領域で極めて重要な現象であり、分子科学の根幹を成している現象であると言っても過言ではありません。身近な例では、物には色が付いており、その色が認識できること、その色が褪せていくこと、新しい物質を生み出す反応が起こること、また光合成などにも強く関係しています。更には物質の構造や性質を理解するための分光学、太陽電池や光触媒反応、フォトニック材料開発などの研究分野では光と物質の相互作用の理解を避けて通ることはできません。ところがこの相互作用の基礎理学的理解は未だ十分なものではありません。これまで物質科学の研究分野では光と物質の相互作用は、双極子近似と呼ばれ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“のっぺりした均一な”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の発生(自己無撞着性)も全く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、数十から百ナノメートルオーダー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不均一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学応答理

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) T. Yasuike and K. Nobusada, "Photoinduced coherent adsorbate dynamics on a metal surface: Nuclear wave-packet simulation with quasi-diabatic potential energy curves using an open-boundary cluster model approach", *Phys. Rev. B* **80**, 035430 (2009).

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学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、不均一性と自己無撞着性が大きな鍵となります。我々は最近、光の空間的不均一性を取りこんだ光学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、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を続けています。また、このように十数ナノメートルを越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、次世代スーパーコンピュータで実機稼働できる超並列数値計算プログラムの開発も同時に行っています。現状で既に、1万並列程度の計算を並列効率が70%程度(一部のアルゴリズムに関しては80%以上を越える効率)で実行しており、更なる大規模並列化プログラミングを進める予定です。



光合成システムと量子デバイス設計

量子ドットにおける励起子ポラリトン伝播モデルを利用した光合成エネルギー伝播システムのモデル化。



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

〈キーワード〉

電子状態理論

計算化学

擬縮重電子系

■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

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推し進めています。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

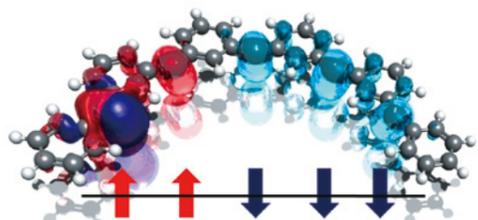
参考文献

- 1) W. Mizukami, Y. Kurashige, and T. Yanai, "Novel Quantum States of Electron Spins in Polycarbenes from ab initio Density Matrix Renormalization Group Calculations," *J. Chem. Phys.* **133**, 091101 (2010) (4 pages).
- 2) T. Yanai, Y. Kurashige, E. Neuscamman, G. K-L. Chan, "Multireference quantum chemistry through a joint density matrix renormalisation group and canonical transformation theory," *J. Chem. Phys.* **132**, 024105 (2010).
- 3) Y. Kurashige and T. Yanai, "High-performance ab initio density matrix renormalization group method: Applicability to large-scale multireference problems for metal compounds," *J. Chem. Phys.* **130**, 234114 (2009).

擬縮重状態、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。

理論分子科学第二研究部門

分子認識の統計力学による生命現象の解明



平田 文男(教授)

1969年北海道大学理学部卒業、1974年北海道大学大学院理学研究科博士課程退学、日本学術振興会奨励研究員、米国ニューヨーク州立大学博士研究員、米国テキサス大学博士研究員、米国ラトガーズ大学助教授、京都大学理学部助教授を経て1995年より現職。TEL: 0564-55-7314 FAX: 0564-53-4660 mail: hirata@ims.ac.jp

〈キーワード〉

分子認識

生命現象

水

蛋白質

DNA

RISM

3D-RISM

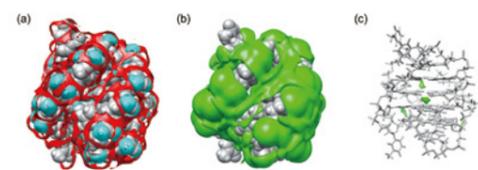
生命現象はタンパク質やDNAなどの生体分子の動き(機能)によって支えられており、その生体分子の機能は「水」という地球上に普遍的に存在する物質の利用を前提としています。水は、生体分子が働く環境として一般的な役割を演じているだけではありません。それは、例えばATPの加水分解反応においては、一つの基質(反応物質)として直接反応に関与し、生命活動に必要なエネルギーを供給する機能分子です。生命体の約70%が水であることは、まさに生命現象にとってきわめて本質的な意味をもっているのです。

水がかかわる生命現象をより深く追求していくと、そこに一つの普遍的「物理化学過程」が存在することに気づきます。それは「分子認識」と呼ばれる過程です。例えば酵素反応において、酵素がその反応ポケットに基質を結合する過程、あるいは抗原・抗体反応で、抗体(レセプター)が抗原(リガンド)を結合する過程などはその典型例です。すなわち、「分子認識」は生体分子がその機能を発現する際に必ず経由する、いわば、生命現象の「素過程」なのです。

分子認識過程は蛋白質、水、およびリガンドの相互作用が複雑に絡みあって起きる過程であり、全体系に及ぶエントロピー変化を含む自由エネルギーを駆動力とする過程です。従って、その理論的記述は本質的に「統計的」あるいは「確率的」にならざるを得ません(蛋白質の活性部位にどれくらいの

確率でリガンドが存在するか?)。私どもはこの「分子認識過程」を統計的に記述する新しい方法論(RISM/3D-RISM理論)を開発しつつあります。¹⁾自由エネルギーを求めるためには、ボルツマン因子に関わるいわゆる「配置積分」をおこなう必要がありますが、RISM/3D-RISM理論では統計力学の方法を使って配置積分を「解析的」に求めます。このため、この方法は系の大きさや時間の長さに関する制限をいっさい受けません。私どもはこの理論を使って、これまで、蛋白質やDNAによる様々な分子認識過程を解明してきました。例えば、リゾチームによる水分子やイオンの結合、アクアポリンによる水やグリセリンの透過、ミオグロビンの一酸化炭素脱離経路、M2チャンネルによるプロトンの透過機構、などです。²⁻⁴⁾

ここでは、最近の研究例として、イオンに誘起されたDNAテロメア構造について述べます。テロメアは染色体の先端部に位置し、人の寿命を規定しています。その構造は4つのグアニン(Gカルテット)が内側に向けて水素結合を形成し、いわゆる四重ラセン構造をとり、このGカルテットの間金属イオンが結合され、構造安定化に寄与していると考えられています。我々はRISM/3D-RISM理論により、まず、NaCl溶液中のNMR溶液構造を再現するとともに、まだ、実験的に知られていないKCl溶液中の構造を予測することに成功しました。⁴⁾



NaCl溶液中のテロメア再安定構造とその周りの(a)水、(b)Naイオンの分布。(c)Gカルテット間のNaイオンの分布。

参考文献

- 1) Hirata, F. ed., Molecular Theory of Solvation, Springer-Kluwer, Dordrecht, Netherlands (2003).
2) N. Yoshida, T. Imai, S. Phongphanphane, A. Kovalenko, and F. Hirata, J. Phys. Chem. B, (Feature Article) 113, 873 (2009).
3) 平田文男, 吉田紀生, Saree Phongphanphane, 「分子認識とイオンチャンネルの統計力学理論」, 寺嶋正秀監修「揺らぎと生体機能」, "Medical Bio," 10月別冊号, 2010.
4) Y. Maruyama, T. Matsushita, R. Ueoka, and F. Hirata, J. Phys. Chem. B, 115, 2408 (2011).

理論分子科学第二研究部門

分子性導体における電子物性と相転移の理論



米満 賢治(准教授)

1985年東京大学理学部卒、1990年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了、理学博士。Los Alamos国立研究所、国際理論物理センター(Trieste)、Georgia大学で博士研究員、東北大学大学院情報科学研究科助手、同工学部助教授を経て1996年2月より現職。TEL: 0564-55-7312 FAX: 0564-53-4660 mail: kxy@ims.ac.jp

〈キーワード〉

光誘起相転移

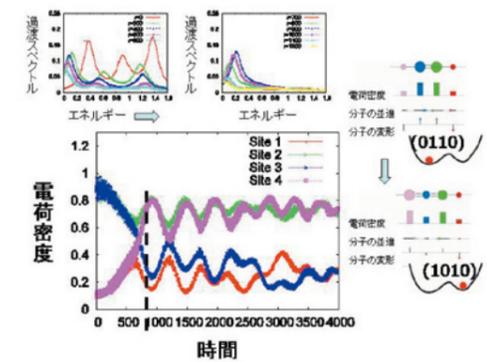
非線形伝導

電荷秩序

強相関電子系

分子が積層して固体になるものの多くは、超伝導、電子スピンの交互に並ぶ反強磁性、電荷が規則的に並ぶ電荷秩序、強誘電性など、多様な電子物性が分子の構成原子、圧力、温度などのわずかな変化で現れます。このような分子性導体は分子の積層方向に由来する、低次元の電気伝導性をもちます。分子軌道の重なりは一般に小さいので、クーロン反発などの影響を受けやすいです。さらに分子そのものが柔らかく、分子配置が変化しやすいので、そのような影響もあります。このような分子性導体の特徴をうまく使うと、照射によって超高速かつ巨視的に電子状態を変えることができ、光誘起相転移と呼ばれています。

熱平衡における電子物性と構造物性を、相互作用する電子、分子振動、格子振動によって記述するモデルが、対象とする物質や現象に応じて存在します。しかしたとえ平衡状態の電子物性を記述できても、照射によって駆動され、平衡状態から大きくかけ離れた状態の時間変化を記述するには不十分で、目立たない自由度や相互作用がキーになることがあります。このような電子状態を、相互作用の強いあるいは弱い極限からの計算や、各種の近似計算、系を小さくするかわりにその中では厳密な計算などを使って、理論的に研究しています。時間変化についても、環境に左右されながら確率的に変化する長時間のふるまいから、いまの状態がわかれば直後の変化がわかるような短時間のふるまいまで、幅広く扱っています。



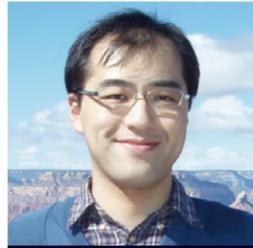
0110のように電荷整列した絶縁体を照射した直後に、1010のような新たな整列パターンが現れ、それまで信じられていた金属とは異なる状態になることを、実験で観測された過渡スペクトルとの比較によって示しました。

光誘起相転移には、電子が反発してお互いに身動きがとれずに凍結しているところを融解することで現れる絶縁体から金属への転移、電荷密度や電荷分極の整列のしかたを変える転移、磁場を加えても磁化の発生しない非磁性から磁化の発生する常磁性への転移、電場を加えずとも電気分極のそろった強誘電からそれがばらばらになった常誘電への転移などがあります。これらについて理論研究を進める中で、分子の間を動き回る電子の速さと分子の中の原子の揺れの速さが同程度になって、量子干渉を起こすことを世界に先駆けて示しました。こうした蓄積を基にすると、どのような波長のレーザーをあてれば電子、分子変位、格子変位を選択的に動かし、巨視的な状態変化をいかに効率的に得られるかなどがわかるはずで、最終的な状態変化は似ていても、そこへ至る経路や時間をレーザーの波長によって変えることも考えています。

相互作用する電子格子系がみせる非平衡現象のひとつに、非線形伝導もあります。電流が流れている状態は、定常状態ですが非平衡なので、それほどわかっているわけではありません。分子性導体に電流を流すと、電荷分布や分子配置が変化して、温度や圧力の変化では現れない状態になるなど、特異な現象が報告されています。これらについても、定常状態を直接扱う理論的な方法などを使って取り組んでいます。

参考文献

- 1) Y. Tanaka and K. Yonemitsu, "Crossover from Bias-Induced to Field-Induced Breakdown in One-Dimensional Band and Mott Insulators Attached to Electrodes," Phys. Rev. B 83, 085113 (11 pages) (2011).
2) Y. Kawakami, T. Fukatsu, Y. Sakurai, H. Unno, H. Itoh, S. Iwai, T. Sasaki, K. Yamamoto, K. Yakushi and K. Yonemitsu, "Early-Stage Dynamics of Light-Matter Interaction Leading to the Insulator-to-Metal Transition in a Charge-Ordered Organic Crystal," Phys. Rev. Lett. 105, 246402 (4 pages) (2010).
3) N. Maeshima, K. Hino and K. Yonemitsu, "Photoinduced Coherent Oscillations in the one-Dimensional Two-Orbital Hubbard Model," Phys. Rev. B 82, 161105 (4 pages) (2010).
4) K. Yonemitsu and K. Nasu, "Theory of Photoinduced Phase Transitions in Itinerant Electron Systems," Phys. Rep. 465, 1-60 (2008).



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

<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

■生体分子機能研究部門 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

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。

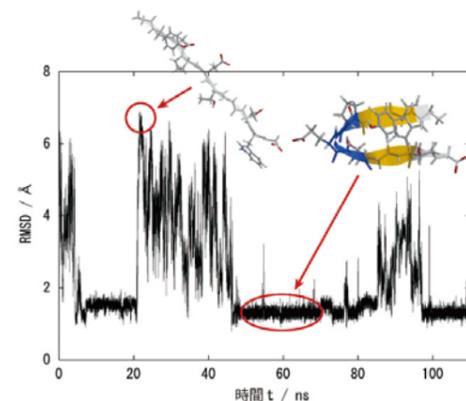
この問題を解決するためこれまでに有力な手法がいくつか提案されてきました。それでもこれまでの方法では温度や圧力を変えたときの構造の変化を理論的に研究することはできませんでした。私はこの問題を解決するための有力な手法「マルチバリック・マルチサーマル法」を最近提案しました。この方法ではシミュレーションの最中に温度を上げたり下げたりすると同時に圧力を上げたり下げたりします。こうするとタンパク質は激しく動くようになります。その結果、図に示すように繰り返しタンパク質を折りたたんだり、ほどいたりすることに成功しました。また温度を上げたり、圧力をかけたりするとどのようにタンパク質が壊れるかも明らかにしました。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

光分子 科学研究領域



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

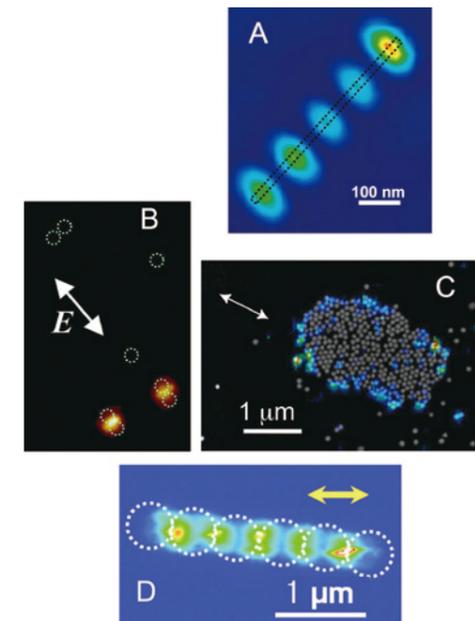
従来の光学顕微鏡では、光の波長(可視光で0.5 μm程度)より小さい形を見ることができませんでした。最近、近接場光学顕微鏡という新しい方法が開発され、それによってナノメートルサイズの物質の観察が可能になりました。ナノサイズ物質のカラー写真(即ちスペクトル情報)を撮ることができ、また私たちの研究室の装置では、10兆分の1秒単位の極めて短時間内に起きる超高速の変化を、刻一刻、場所ごとに調べることが可能です。カラー写真が撮れるのは光を使ってこそできるのは当然ですが、超高速の現象をとらえることも、光を使って初めて可能になります。また私たちは、貴金属からできたナノ物質では、物質の特性に深く関わる「波動関数」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。通常、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、私達は、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して光が、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、貴金属の微粒子がもつ光を集める特異な性質が、この現象に深く関わる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いきたいと考えています。

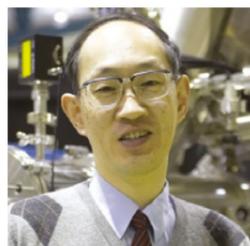
参考文献

- 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。

■光分子科学第三研究部門
内殻励起の分子科学: X線局所電子構造解析法の基礎と応用



小杉 信博(教授)

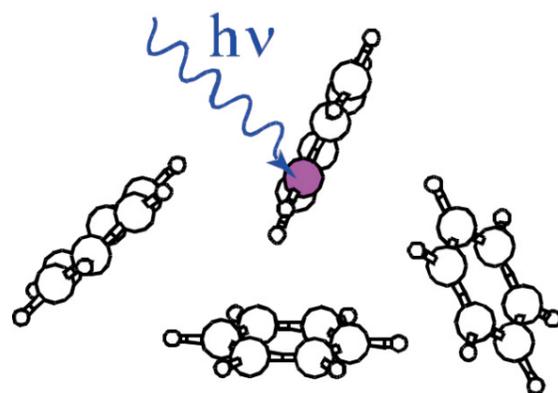
1976年京都大学卒、1981年東京大学大学院理学系研究科修了、理学博士。日本学術振興会奨励研究員、東京大学理学部助手・講師、京都大学助教授を経て1993年1月より現職。1994年4月～2010年5月UVSOR施設長兼任。1996年カナダ・マックマスター大学、2008年フランス・P&Mキュリー(パリVI)大学、2011年フランス・パリ南(パリXI)大学・客員教授。
TEL: 0564-55-7390
FAX: 0564-54-7079
mail: kosugi@ims.ac.jp

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つ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、凝縮分子・分子固体、固体中の不純物分子、液体分子、溶質・溶媒分子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トロン光源加速器施設(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。特に、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になり、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るようになりました。相互作用の解析から、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に成功しています。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固体のバンド分散の観測にも成功しています。



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。

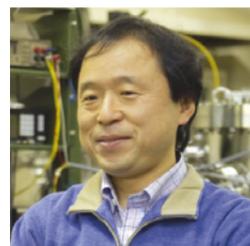
<キーワード>

X線分光

内殻励起

局所電子構造解析

分子間相互作用



見附 孝一郎(准教授)

1981年東京大学理学部化学科卒、1986年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了、理学博士。東京大学教養学部助手を経て1991年4月より現職。
TEL: 0564-55-7445, 7446
FAX: 0564-53-7327
mail: mitsuke@ims.ac.jp

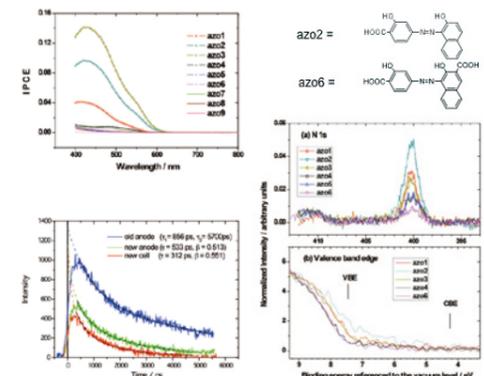
■光分子科学第三研究部門
極端紫外光誘起素反応のダイナミクス

高速電子から生み出されるシンクロトロン放射(放射光)は理想的な真空紫外・軟X線光源です。極端紫外光は化学結合エネルギーに匹敵し物質との相互作用が本質的に大きいので、分子等の電子状態を調べる際の絶好のプロブとなります。私達は6nmから200nmの極端紫外光を用いて、気相分子、クラスター、フラレーンの光イオン化と光解離の分野で次の主題に長年取り組んできました: (a) 正負イオン対生成機構と動力学、(b) 波長掃引2次元光電子分光法の開発とイオン化や解離の動力学、(c) レーザーと放射光のポンプ・プローブまたは2重共鳴分光。最近では、フラレーンの屈折率と誘電率の測定を10nm以下の短波長領域まで延ばすことに成功すると共に、フラレーンイオンから炭素クラスターへの分解反応機構の研究に精力を注いでいます。2010年に、電子イオン同時検出と速度画像観測の技術を組み合わせることで、クラスターの3次元速度を秒速8m以内の分解能で決めることができました。さらに、特殊データ解析を併用してサイズ70から52までの炭素クラスターイオンについて、C₂分子を1つ放出するたびにどれだけ内部温度が下がるかを評価することに世界で初めて成功しました。2011年1~3月にはスマネンC₂₁H₁₂やコロネンC₂₄H₁₂でも同様の成果を得始めています。私達の速度分布測定法はフラレーンに限らず高沸点物質全般を対象とするので、将来は高分子重合体の立体構造の規則性を調べる目的にまで応用できると期待しています。

私達のグループは有機太陽電池の電子移動機構の解明と発電性能や耐久性の向上を目指した研究にも極端紫外光を利用しています。化石燃料の資源枯渇、炭酸ガスによる地球温暖化、原子力発電所事故などのエネルギー・環境問題の解決に関わる再生可能エネルギー技術の中で、近い将来、太陽電池を用いた太陽光発電が中核になると考えられます。太陽電池の本格的普及に向けて、結晶系シリコン電池以外の低コストかつ軽量でフレキシブルな有機系太陽電池の需要が大いに見込まれます。私達は、プラスチック基板上に変換効率10%の有機太陽電池を構築する目標を掲げ、太陽電池の発電メカニズムの解明と試作品の評価技術確立を目指した基礎研究を開始しました。有機系太陽電池の高効率化のためには、新規素材の設計と合成が不可欠であり、この観点から、(1) バルク敏感なX線光電子分光によるナノ微粒子ヘテロ接合及び金属電極・有機接合における電子状態観測、(2) レーザー時間分解発光及び過渡吸収分光による励起分子やキャリアの緩和寿命測定などを行っています。さらに、可視・近赤外領域に大きな光吸収断面積を有し、接合界面での電子移動や励起子の電荷分離を高速で起こす新素材の開発計画や、レーザー又はX線吸収分光により太陽電池試作品の残留不純物を定量し劣化前後の結合状態変化を観測する計画等も提案しています。

参考文献

- 1) J. Kou, T. Mori, Y. Kubozono and K. Mitsuke, "Photofragmentation of C₆₀ in the extreme ultraviolet: Statistical analysis on the appearance energies of C_{60-2n}^{z+} (n≥1, z=1-3)," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 119-123 (2005).
- 2) H. Yagi, K. Nakajima, K.R. Koswattage, K. Nakagawa, C. Huang, Md.S.I. Prophan, B.P. Kafle, H. Katayanagi and K. Mitsuke, "Photoabsorption cross section of C₆₀ thin films from the visible to vacuum ultraviolet," *Carbon* **47**, 1152-1157 (2009).
- 3) H. Katayanagi and K. Mitsuke, "Mass-analyzed velocity map imaging of thermal photofragments from C₆₀" *J. Chem. Phys. (Communication)* **133**, 081101 (4 pages) (2010).



光電子分光による太陽電池の電極界面におけるエネルギー準位観測およびレーザー過渡発光による太陽電池のキャリア注入速度の精密測定と寿命決定因子の探索などを推進しています。



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

■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

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。

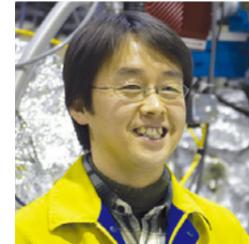
UVSORは高い電子ビーム性能を誇りながら、加速器としては比較的小型で小回りが利きます。上記のような光発生に関する基礎研究を行うには最適な施設です。今後さらに、実用化も意識しながら、研究を進めていきたいと考えています。また、超高輝度電子蓄積リングや直線型加速器を用いた自由電子レーザー装置など、将来の施設の全面更新に備えた次世代シンクロトロン光源の設計検討にも着手しています。



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



木村 真一(准教授)

1988年東北大学理学部卒業、
1991年東北大学大学院理学
研究科博士課程修了、理学博
士。日本学術振興会特別研究
員、神戸大助手、分子研助手、
神戸大助教授を経て現職。
1999~2002年科学技術振興
事業団さきがけ研究21研究
者兼任、2001年日本放射光
学会若手奨励賞受賞、2008年
科学技術分野の文部科学大
臣表彰科学技術賞受賞。
TEL: 0564-55-7202
FAX: 0564-54-7079
mail: kimura@ims.ac.jp

■光物性測定器開発研究部門 電子構造の直接観測から生み出す固体の新しい機能性の開拓

携帯電話やインターネットに代表される現代の高度情報化社会を担っているのは、シリコンをはじめとする半導体です。シリコン中の電子は、電子間相互作用の弱い極限で運動しており、バンド理論と呼ばれる固体物理学の基本理論で説明できます。近年、シリコンなど半導体の対極にある電子間相互作用の強い物質、いわゆる「強相関伝導系」に注目が集められています。そこでは、電子の運動エネルギーと電子間に働くクーロン相互作用との大小が物性を支配しており、その境界(量子臨界点)の近くで、超伝導、巨大磁気抵抗、非フェルミ液体などのきわめて多彩な物性が出現することが最近の研究でわかってきました。今後も多彩な物性が生み出されるものと考えられ、次世代の社会基盤を担っていく材料となることが期待されています。

これらの物性は、電気抵抗や帯磁率などの熱

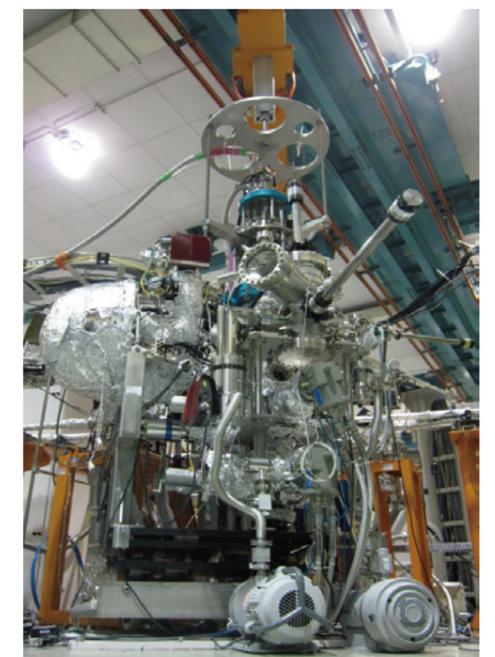
力学的な測定に主に現れますが、その起源は、物質のフェルミ準位のごく近傍の電子状態が担っています。その電子状態を区別して直接観測できるのが、光電子分光や光反射分光などの光学測定です。私たちの研究グループは、UVSOR-IIやSPring-8などのシンクロトロン光を使って、強相関伝導系の分光研究を行っています。シンクロトロン光は、テラヘルツ・遠赤外からX線まで切れ目のない連続な光であり、かつ高輝度でかつ偏光特性に優れており、実験室とは違ったまったく新しい分光実験を行うことができます。そこで、新奇機能性を生み出す電子構造を観測するためのシンクロトロン光を使った新しい分光法の開発と、機能性薄膜や機能性固体の開発を組み合わせ、ミクロな電子構造を制御しながら機能性の発現機構を観察する新たな方法論を開拓しようとしています。

参考文献

- 1) S. Kimura *et al.*, "Electronic-Structure-Driven Magnetic Ordering in a Kondo Semiconductor CeOs₂Al₁₀," *Phys. Rev. Lett.* **106**, 056404 (2011).
- 2) Y. Zhang, S. Kimura *et al.*, "Nodeless superconducting gap in A_xFe₂Se₂ (A = K,Cs) revealed by angle-resolved photoemission spectroscopy," *Nature Materials* **10**, 273 (2011).
- 3) H. Miyazaki, S. Kimura *et al.*, "Direct Observation of Momentum-Dependent Exchange Interaction in a Heisenberg Ferromagnet," *Phys. Rev. Lett.* **102**, 227203 (2009).
- 4) H.J. Im, S. Kimura *et al.*, "Direct Observation of Dispersive Kondo Resonance Peaks in a Heavy-Fermion System," *Phys. Rev. Lett.* **100**, 176402 (2008).

〈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・赤外分光



我々が開発したUVSOR-II BL7U真空紫外3次元角度分解光電子分光ビームライン。



■先端レーザー開発研究部門
超短光パルスの研究



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: fuji@ims.ac.jp

〈キーワード〉

レーザー

超短光パルス

超高速現象

光合成に代表されるように、光化学反応は光から分子へエネルギーを変換する過程であり、基礎から応用の研究において重要な化学反応と言えます。このような光化学反応の研究において、高度に制御された光、つまりレーザー光は、実験で使用する道具として、なくてはならないものとなっています。

光から分子へエネルギーを転送するプロセスのうち、極めて効率の高いエネルギー変換過程の多く(例えば、光合成の初期過程や視物質の光化学反応)は超高速で起こり、そのスピードはフェムト秒(10^{-15} s)オーダーです。そうした反応過程を研究、制御するためには、フェムト秒、アト秒(10^{-18} s)のパルス幅をもったパルス光が必要です。

本研究室では、分子科学において重要となる最先端のレーザー光源開発、特にフェムト秒やアト秒の超短光パルスの発生技術、計測技術の研究・開発を行います。

分子科学の研究においては、様々な波長のレーザーが使われています。多くの分子振動に共鳴した中赤外領域(3-20 μ m)から光イオン化に有用な真空紫外領域(~70nm)まで広帯域に渡っていま

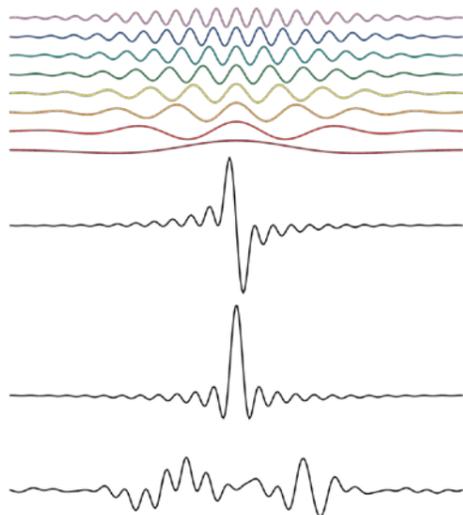
参考文献

- 1) T. Fuji and T. Suzuki, "Generation of sub-two-cycle mid-infrared pulses by four-wave mixing through filamentation in air," *Opt. Lett.* **32** 3330-3332 (2007).
- 2) T. Fuji, T. Suzuki, E. E. Serebryannikov and A. Zheltikov, "Experimental and theoretical investigation of a multicolor filament," *Phys. Rev. A* **80** 063822 (2009).
- 3) P. Zuo, T. Fuji, T. Suzuki, "Spectral phase transfer to ultrashort UV pulses through four-wave mixing," *Opt. Express* **18** 16183-16192 (2010).

す。それぞれの波長域でフェムト秒パルスを発生させることはできています。それらのパルスを同時に発生させ、位相関係まで揃えて重ね合わせることができれば、様々な形の波形を作り出すことができます(図を参照)。このような光を道具として使うことができるようになれば、光化学反応の研究・制御において、新しい展開が期待できます。

赤外から真空紫外まで位相の揃った光を一度に発生させることは、極めて困難と思われませんが、わたしがこれまで行ってきた気体を用いた波長変換技術を用いることで、実現の可能性ができています。その手法によって、真空紫外(~167nmまで)と赤外(~6 μ mまで)の超短光パルスを効率よく発生させることに成功しました。¹⁻³⁾実際に上記の手法で発生した200nm、260nmの深紫外光パルスを多原子分子を対象とした超高速光電子分光に応用することも行うことができます。

この技術をさらに高めることによって、発生させる光の波長やパルス幅、位相などを自在に制御し、自在な形の光波を作りだせるような、究極的な超短光パルス発生装置を実現することをめざします。



上の様々な波長(色)の光電場を、位相を制御して重ねることで、下(黒線)のような様々な波形の光電場を作り出すことができる。

物質分子
科学研究領域



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

〈キーワード〉

表面薄膜磁性

分子磁性

磁気顕微鏡

表面分光

■電子構造研究部門
表面科学的制御を基にした新規磁性薄膜の創製・評価と新しい磁気光学測定手法の開発

ナノスケール磁性薄膜は巨大磁気抵抗や垂直磁化などの興味深い磁気特性を示し、今日のハードディスクに実用化されており、基礎科学的にも広く研究が行われています。我々は、基板表面を化学修飾することで作成される新奇ナノ磁性体の磁気特性や、磁性薄膜表面を化学修飾することで発現する新たな磁気特性などに注目し、分子研放射光施設 UVSOR-II BL4Bにおいて超真空仕様超伝導磁石極低温クライオスタットを用いたX線磁気円二色性法(XMCD)測定や、実験室における磁気光学 Kerr効果(MOKE)などの分光的手法を用いて、様々な磁性薄膜の磁気特性検討を行っています。

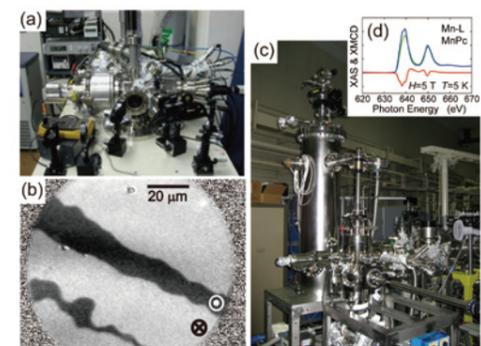
例えば、強磁性体である金属Coは、清浄なCu(110)基板の上では島状にランダムな成長をしますが、基板をNで化学修飾したCu(110)-(2 \times 3)N表面では、自己組織的にCoナノロッドが形成されます。Co 0.8原子層では、幅5原子、高さ2原子のロッドになります。棒磁石は、通常、軸方向に磁化されやすい性質をもちますが、このCoナノロッドは、この常識に反して、ロッドに垂直に磁化されやすい特徴をもつことがわかりました。高磁場(5 T)極低温(4.9 K)

参考文献

- 1) T. Nakagawa and T. Yokoyama, "Magnetic circular dichroism near the Fermi level," *Phys. Rev. Lett.* **96**, 237402 (2006).
- 2) "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**(2007) 023907 (5 pages).
- 3) "Enhancements of Spin and Orbital Magnetic Moments of Submonolayer Co on Cu(001) Studied by X-ray Magnetic Circular Dichroism Using a Superconducting Magnet and a Liquid He Cryostat" T. Nakagawa, Y. Takagi, Y. Matsumoto and T. Yokoyama, *Jpn. J. Appl. Phys.* **47** (2008) 2132-2136.
- 4) "Magnetic Circular Dichroism for Surface and Thin Film Magnetism: Measurement Techniques and Surface Chemical Applications" T. Yokoyama, T. Nakagawa and Y. Takagi, *Int. Rev. Phys. Chem.* **27** (2008) 449-505.

下でのXMCD測定により、この理由が異方的なスピン軌道相互作用に起因するもので、軸垂直で表面平行方向のスピン軌道相互作用が軸平行方向や表面垂直方向に比べて大きいことがわかりました。

また、新しい測定手段の研究として、紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の開発を行っています。これまで、紫外光による磁気円二色性は、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付近に合わせると、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。また、現在は、キラル物質を識別するためのキラルナノ顕微鏡を、紫外自然円二色性光電子顕微鏡により開発することを試みています。



(a) 紫外磁気円二色性光電子顕微鏡システム。(b) 12原子層Ni薄膜[基板はCu(001)面]の紫外磁気円二色性光電子顕微鏡像。暗部が上向き磁化の磁区、明部が下向き磁区に対応しています。(c) UVSOR-IIIに設置の高磁場極低温X線磁気円二色性観測システム。(d) 分子磁性体MnフタロシアニンのMn-L吸収端X線磁気円二色性スペクトル。

■電子構造研究部門

表面を媒体とした新しい金属錯体触媒構造の創出と選択触媒反応制御



唯 美津木(准教授)

平成16年東京大学大学院理学系研究科博士課程中退、平成17年博士(理学)(東京大学)取得。東京大学大学院理学系研究科化学専攻助手、助教、准教授を経て、平成20年10月より現職。高輝度光科学研究センター客員研究員(併任)。
TEL: 0564-55-7351
FAX: 0564-55-2254
mail: mtada@ims.ac.jp

〈キーワード〉

固定化金属錯体

触媒表面

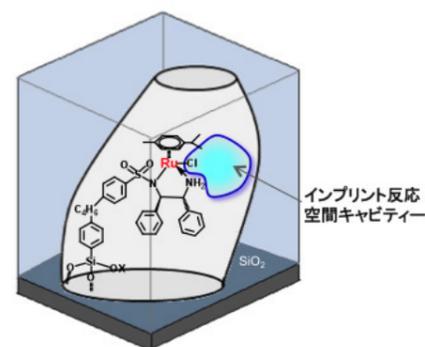
触媒構造解析

社会で必要とされる多くの有用化合物は、触媒の助けを借りて人工的に効率的に合成されており、限られた原料から目的の有用化合物を効率的に創り出すことのできる新触媒の創出は、極めて重要な課題の一つです。特に、固体触媒は多くの化学工業プロセスで汎用されており、均一系の錯体触媒や生体酵素触媒などが有さない熱的安定性や耐久性を有しており、固体触媒表面の構造に基づいた特徴ある触媒作用が得られることが多いです。しかしながら、固体触媒表面の構造は一般に複雑で不均質であり、表面における真の触媒活性種の構造を理解することは困難である場合が多く、更にその表面に触媒活性種となる金属種等を、目的とする反応に応じて分子レベルで構造制御して構築することは依然として困難です。

我々は、酸化物固体表面を媒体として、構造の規定された金属種である金属錯体の表面固定化と表面での選択的な構造変換を通じ、固体表面上に分子レベルで制御された金属活性構造とその近傍の選択的触媒反応場を構築することを目指しています。例えば、固定化金属錯体の配位子を鑄型分子として、その鑄型分子の形状を記憶させた反応空間を触

媒活性点となる固定化金属錯体の近傍に有する表面分子インプリンティング触媒の設計、創出を行っています(下図)。また、様々な金属錯体をシリカやアルミナなどの異なる性質を有する酸化物表面に直接固定化し、金属錯体の配位構造を変化させることで、前駆体である金属錯体が有さない触媒活性を引き出すことにも取り組んでいます。

更に、我々は、触媒反応条件下における触媒活性構造のダイナミックな変化や動きを明らかにするために、SPring-8の高輝度X線を用いたin-situ 時間分解XAFS法、in-situ空間分解XAFS法を用いたin-situ触媒構造反応解析も行っています。選択酸化触媒や燃料電池電極膜などの高活性実触媒系について、クイックXAFSやエネルギー分散型DXAFS測定法を駆使して、一過性の反応過程における活性金属種のXAFSスペクトルを連続して計測することで、触媒反応過程における活性金属種の構造速度論を明らかにすることに取り組んでいます。また、X線マイクロビームを用い、燃料電池電極膜や固体触媒粒子のin-situ空間分解XAFS計測を行い、不均質な固体触媒に内在する新現象の解明に関する研究にも取り組んでいます。



水中で働く表面分子インプリンティングRu固定化錯体。シリカ表面に固定化したRu錯体の配位子を鑄型として、鑄型分子の形状をインプリントさせた触媒反応空間を構築。

参考文献

- 1) M. Tada and Y. Iwasawa, "Advanced Chemical Design with Supported Metal Complexes for Selective Catalysis", *Chem. Commun.*, 2833-2844 (2006).
- 2) M. Tada, "Surface-Mediated Design and Catalytic Properties of Active Metal Complexes for Advanced Catalysis Creation", *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **83**, 855-876 (2010) [Award Accounts].
- 3) M. Tada, S. Muratsugu, M. Kinoshita, T. Sasaki, and Y. Iwasawa, "Alternative Selective Oxidation Pathways for Aldehyde Oxidation and Alkene Epoxidation on a SiO₂-Supported Ru-Monomer Complex Catalyst", *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 713-724 (2010).
- 4) Z. Weng, S. Muratsugu, N. Ishiguro, S. Ohkoshi, and M. Tada, "Preparation of Surface Molecularly Imprinted Ru-Complex Catalysts for Asymmetric Transfer Hydrogenation in Water Media", *Dalton Trans.* **40**, 2338-2347 (2011).
- 5) M. Tada, Y. Uemura, R. Bal, Y. Inada, M. Nomura, and Y. Iwasawa, "In-situ Time-Resolved DXAFS for the Determination of Kinetics of Structural Changes of H-ZSM-5-Supported Active Re-Cluster Catalyst in the Direct Phenol Synthesis from Benzene and O₂", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 5701-5706 (2010).

■電子物性研究部門

分子性固体の磁気共鳴研究



中村 敏和(准教授)

1987年京都大学理学部卒、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

〈キーワード〉

電子スピン共鳴

核磁気共鳴

有機導体

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、まだ未解決の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換えたり、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。これら分子性導体

参考文献

- 1) F. Iwase, K. Sugiura, K. Furukawa and T. Nakamura, "The ground states and critical behavior in the quasi-one-dimensional complexes (TMTTF)₂[AsF₆](SbF₆)_{1-x}," *Phys. Rev. B* **81** (2010) 245126 (6pages).
- 2) 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).
- 3) K. Furukawa, T. Nakamura, Y. Kobayashi and T. Ogura, "Novel Type of Career Generated System: Magnetic Investigations of TTF-Based Self-Doped Hydrogen-Bonding Conductor," *J. Phys. Soc. Jpn.* **79** (2010) 053701 (4 pages).
- 4) K. Furukawa, Y. Sugishima, H. Fujiwara and T. Nakamura, "Photo-induced Triplet States of Photoconductive TTF-derivatives Including a Fluorescent Group," *Chem. Lett.* **40** (2011) 292-294.

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。

私たちは超高压力下でも核磁気共鳴が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。¹⁾ また最先端のパルス電子スピン共鳴法を駆使して、基底状態相転移近傍のスピンの動的挙動を調べ、従来考えられていたのとは異なるスピン-重項状態をとることを明らかにしています。²⁾ 一方、全く新しいタイプの分子性導体に関し、強磁場の電子スピン共鳴法を用いることでミクロなレベルでスピン状態や電子状態を調べ、新しいタイプの分子性導体が構築されていることを証明しています。³⁾ さらに最近では、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。⁴⁾

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。



多周波パルス時間分解ESR分光器。

■ナノ分子科学研究部門
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形で、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。

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", *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).

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、数年以内に実用に十分な、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、フラーレン(C₆₀)を単結晶として取り出してセブンナイン(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、セブンナイン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 接合の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。

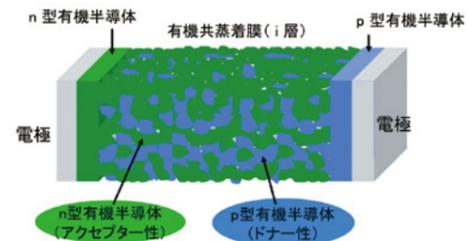


図1: p-i-n/バルクヘテロ接合(有機混合接合)の概念。

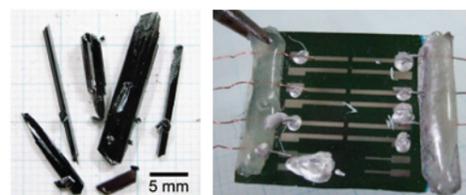


図2: セブンナイン(7N, 99.99999%)C₆₀単結晶。 図3: 5.3%最高効率p-i-nセルの写真。

■ナノ分子科学研究部門
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。

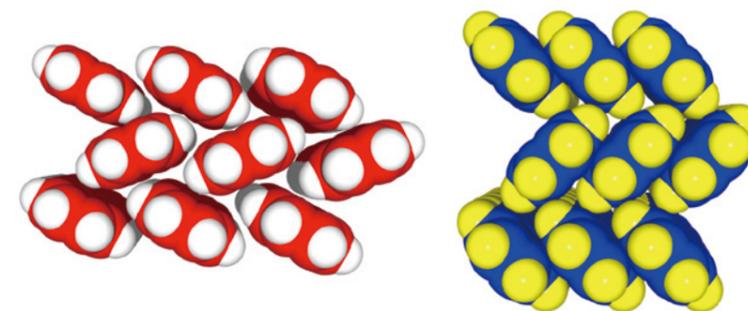
半導体にはp型とn型の2種類あります。p型では、正孔(ホール)がキャリアとなり、プラスの電荷が固体中を移動していきます。一方、n型では電子が主体となります。有機半導体の研究はすでに半世紀以上の歴史がありますが、デバイス材料として使われ始めたのは1980年代の後半からです。有機物の場合、カチオンラジカル(正孔)のほうがアニオンラジカル(電子)より安定となる物質が多くあります。そのため、p型半導体の研究が主流となり、n型半導体の有機材料はあまり知られていませんでした。アニオンラジカルは、分子上に余分な電子が1個あるわけですから、これを安定化させるような構造を考えてやればよいわけです。このためには、π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

〈キーワード〉

有機半導体
有機EL
有機トランジスタ

〈キーワード〉

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

■ナノ分子科学研究部門
人工分子で光合成系を組み立てる



永田 央(准教授)

1987年京都大学理学部卒、
1990年京都大学大学院理学
研究科博士課程中退、博士
(理学)。京都大学理学部助手、
日本学術振興会海外特別研
究員を経て1998年より現職。
TEL/FAX: 0564-59-5531
mail: toshi-n@ims.ac.jp

私たちが取り組んでいる研究は、人工の分子を使って植物の光合成と同じ仕組みを作ろう、というものです。光合成で起こっていることを化学の言葉でまとめると、「太陽光のエネルギーを利用して、水を酸化して酸素にし、同時に二酸化炭素を還元して炭水化物にする」となります。原理的には実に簡単な反応ですが、実際にはとても奥が深いのです。炭酸水にいくら光を当てても、少し温度が上がらただけで、決して酸素や炭水化物ができたりはしません。光合成の反応が起きるためには、分子を使ったいろいろな「仕掛け」が必要なのです。

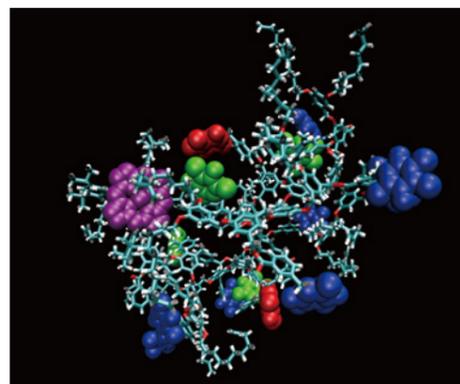
まず、やってきた光を吸収する分子が必要です。植物は、クロロフィル(葉緑素)を使っています。私たちは、ポルフィリンやフタロシアニンといった人工分子を使います。これらの分子が光を吸収してエネルギーの高い状態(励起状態)になると、近くにある別の分子に電子を一個渡して、自分は酸化された状態に、相手の分子を還元された状態に変化させます。これが光合成反応の第一歩です。

ここで、酸化された分子が渡した相手から電子を取り返してしまうと、何も反応が起きずに元に戻ってしまい、失敗です。そうならないように、どんどん電子を別の分子に受け渡して行かないといけません。とはいえ、一電子を渡したりもらった分子は活性が高く、こちらが希望する相手とだけ反応させることは至難です。このため、植物の光合成では、色素から放出された電子をキ

ノンという分子にいったん溜め込む仕掛け(キノンプルール)を持っています。私たちも、光を吸収したポルフィリンが放出した電子を、キノンに溜め込む仕掛けを作りました(文献1、2)。

キノンに電子を溜め込む仕掛けは、別の意味も持っています。植物の光合成では、光を使う反応が二種類あります。一方ではキノンを還元し(同時に水を酸化し)、もう一方では還元されたキノンを再酸化します(同時に、二酸化炭素の還元剤となるNADPHを生成します)。一種類の光反応では水の酸化とNADPHの生成を同時に起こすのに十分な化学ポテンシャルが得られないのですが、間にキノンの酸化還元を介することで、二種類の光反応を接続して化学ポテンシャルを稼ぐ仕掛けになっているのです。これをZ-スキームと呼びます。私たちは、遷移金属錯体とポルフィリンを使って、キノン還元体の再酸化を光反応と組み合わせました(文献3)。Z-スキームを組み立てるのに必要な部品はこれで一応揃ったことになります。

「植物や太陽電池に勝てるの?」とよく質問されます。なにをもって「勝ち」とするか、が大事だと思います。植物の光合成には、私たちの知らない分子の働きがたくさん隠されています。見ているだけでは気がつかなかったことが、作ってみて初めてわかってくる。そして光エネルギー変換に関する私たちの共有知識が広がっていく。これを「勝ち」と呼びたいな、と私は思っています。



分子1個でできたキノンプルール。
28個までの電子を溜め込むことができます。

参考文献

- 1) T. Nagasawa, S. I. Allakhverdiev, Y. Kimura and T. Nagata, "Photooxidation of Alcohols by a Porphyrin/Quinone/TEMPO System," *Photochem. Photobiol. Sci.* **8**, 174-180 (2009).
- 2) T. Nagata and Y. Kikuzawa, "An Approach towards Artificial Quinone Pools by Use of Photo- and Redox-active Dendritic Molecules," *Biochim. Biophys. Acta* **1767**, 648-652 (2007).
- 3) H. Kon and T. Nagata, "Syntheses of the Terpyridine-Bipyridine Linked Binary Ligands and Structural and Redox Properties of Their Cobalt Complexes," *Inorg. Chem.* **48**, 8593-8602 (2009).

<キーワード>

- 光合成
-
- 電子移動
-
- ポルフィリン
-
- キノン
-
- 金属錯体

■ナノ分子科学研究部門
ナノサイズのお椀と粒:「バッキーボール」と「クラスター触媒」に関する研究



櫻井 英博(准教授)

1989年東京大学理学部卒業、1994年同大学大学院理学系研究科博士課程修了、博士(理学)。東京大学大学院理学系研究科助手、日本学術振興会海外特別研究員(ウイスコンシン大学)、大阪大学大学院工学研究科講師、同助教授を経て、2003年10月より現職(併任、2004年4月より専任)。2007年10月~2011年3月科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業PRESTO研究員兼任。
TEL: 0564-59-5525
FAX: 0564-59-5527
mail: hsakurai@ims.ac.jp

サッカーボール構造を有するC₆₀を始めとしたフラレン化合物や、カーボンナノチューブなどの3次元π系炭素化合物は、その特異な構造より多くの物理学者、化学者の注目を集めていましたが、最近はこちらが特に電子材料などにおける次世代材料として有望視されており、C₆₀やナノチューブの大量生産技術が開発されたことも相まって、精力的に研究が行われている物質群のひとつです。一方、フラレンの部分構造、あるいはナノチューブのキャップ構造に相当するお椀型共役化合物「バッキーボール」も、単なるフラレン類のモデル化合物してのみならず、新規人工(ヘテロ)フラレン類や単一組成カーボンナノチューブの出発原料として、またそれ自身の特異な物理的性質を利用した新規物質群の基本骨格として、その重要性はますます高まりを見せています。しかしながら、これらのバッキーボール分子は、その大きな歪み構造のために一般に合成が非常に困難であり、これが研究の進展の大きな妨げとなっていました。

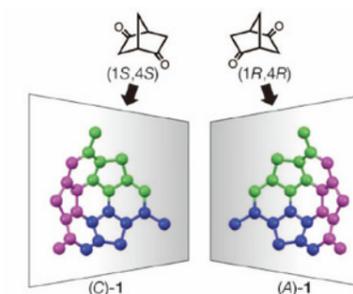
そこで、我々は従来とは全く異なる発想のバッキーボールの合成戦略を考案し、これまで不可能だった、C₆₀のC₃対称基本骨格構造を有する「スマネン」という化合物の合成をはじめ、キラルバッキーボールの不斉合成、含窒素バッキーボール

の合成などに成功してきました。我々のグループでは、この魅力あるバッキーボール類をできるだけ「シンプル」にかつ「エレガント」に合成する経路を確立し、さらに合成した化合物の物性や錯体触媒への応用を目指しています。

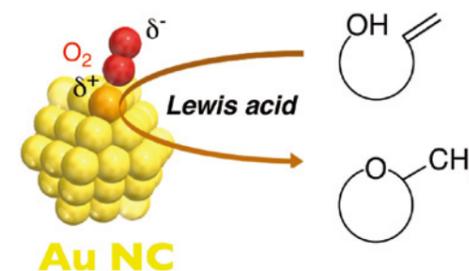
一方、ナノチューブの精密合成を目指す際には、その「種」となるバッキーボールの精密合成と同時に、その種から正確にグラフェンシートを構築する「ナノ」サイズの触媒の開発が不可欠となります。我々はナノメートルサイズの金属触媒の持つ様々な特性に注目し、その調製法と新反応の開発に取り組んでいます。最終的にはこれらのナノサイズの「お椀」と「粒」の研究分野を融合し、合成化学者にしか到達し得ない新しいナノサイエンスを切り拓いていきたいと考えています。

参考文献

- 1) "A Synthesis of Sumanene, a Fullerene Fragment", H. Sakurai, T. Daiko, and T. Hirao, *Science*, **301**, 1878 (2003).
- 2) "Asymmetric Synthesis of a Chiral Buckybowl, Trimethylsumanene", S. Higashibayashi, and H. Sakurai, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 8592 (2008).
- 3) "Aerobic Oxidations Catalyzed by Colloidal Nanogold", T. Tsukuda, H. Tsunoyama, and H. Sakurai, *Chem. Asian J.* **6**, 736 (2011).



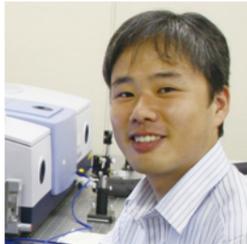
キラリテを持つバッキーボールの合成。



金ナノクラスターの特異な触媒活性。

<キーワード>

- 精密有機合成
-
- バッキーボール
-
- クラスター触媒
-
- ナノサイエンス



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

〈キーワード〉

赤外分光法

膜タンパク質

イオンチャネル

トランスポーター

■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っています。

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への登録比率は約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。

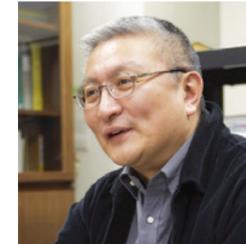
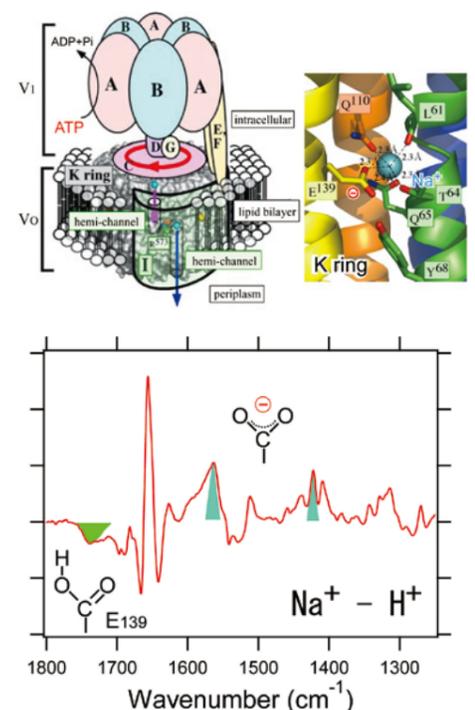
参考文献

- 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, 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) V型ATPaseの構造模式図とKリングの結晶構造。
(下) 赤外分光法で明らかとなったKリングのNa⁺イオン脱着に伴う構造変化。E139がNa⁺結合に伴い脱プロトン化する。

基質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。私自身も前任地である名古屋工業大学において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、基質結合による赤外差スペクトルを計測することで、塩化物イオン結合に伴うアスパラギン酸のプロトン化を検出しました³⁾。この手法は、KcsAなどのイオンチャネル、V型ATPase⁴⁾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、ケージド化合物やストップフロー法、連続混合法などを活用することでマイクロ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。



魚住 泰広(教授)

1984年北海道大学薬学部卒業、
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

触媒の不斉合成

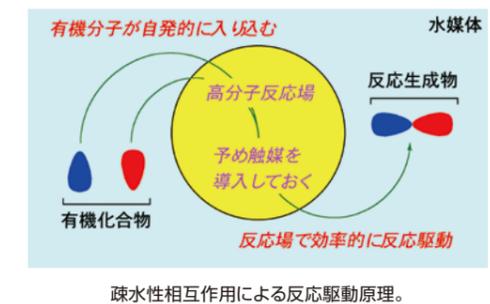
固定化触媒

■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、タンパク質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、アリル位置換反応や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

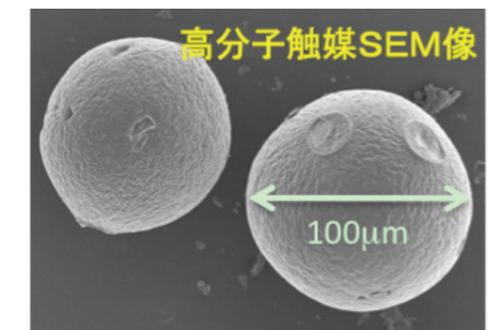


疎水性相互作用による反応駆動原理。

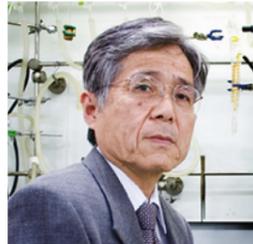
に集まり、高効率で触媒反応が駆動されます。すなわち外部からのエネルギーなどに依らず、分子が持つ性質そのものを駆動力とする反応システムです。我々は錯体触媒の精緻な分子設計に加えて、触媒を膜状にマイクロ流路反応装置内に発生させる新技術や、疎水性反応場を分子の自己集積によって反応系内で自発的に発生させる仕組みの創出など、反応システム全体の設計と構築による21世紀の有機化学反応のパラダイムシフトを目指します。

参考文献

- 1) Yasuhiro Uozumi, "Recent Progress in Polymeric Palladium Catalysts for Organic Synthesis [Review]" *Top. Curr. Chem.* **2004**, **242**, 77-112
- 2) Yasuhiro Uozumi, Y. M. A. Yamada, T. Beppu, N. Fukuyama, M. Ueno, T. Kitamori "Instantaneous Carbon-Carbon Bond Formation Using a Microchannel Reactor with a Catalytic Membrane" *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, **128**, 15994-15995
- 3) 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
- 4) 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



反応駆動の「場」を提供する高分子。



田中 晃二(教授)

1969年大阪大学卒、1971年大阪大学大学院工学研究科修士課程修了、大阪大学工学部助手、米国ジョージア大学博士研究員、大阪大学工学部助教授を経て現職。
TEL: 0564-59-5580
FAX: 0564-59-5582
mail: ktanaka@ims.ac.jp

<キーワード>

- 二酸化炭素の多電子還元反応
- 化学エネルギー変換
- 光誘起多電子移動反応
- 有機ヒドリド試薬の開発
- 再生可能な酸化剤・還元剤の開発

■錯体物性研究部門 化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換を目指した錯体触媒の合成

再生過程がなく化石燃料の大量使用で引き起こされている現状の深刻な資源・エネルギー・環境問題の軽減・解決は今世紀の科学者に課せられた最重要研究課題です。その実現には熱力学的平衡電位近傍での物質変換を可能にする触媒による物質循環に共役した高効率のエネルギー変換システムの構築が必要不可欠です。金属錯体の中心金属イオンの酸化還元電位を物質変換反応に対応した特定の電位に設定することは非常に困難です。一方、酸化還元能を有する有機化合物の酸化還元電位は置換基を導入することで比較的容易に制御が可能です。以上の観点から私たちは酸化還元活性な配位子を用いて金属錯体(分子性触媒)の酸化還元電位を制御し、中心金属を反応場、配位子を電子貯蔵庫とする分子性触媒開発を行い、二酸化炭素の多電子還元反応ならびに有機物の酸化反応による電気エネルギーと化学エネルギーの相互変換を行うことを目指しています。

二酸化炭素は低原子価金属錯体とは金属-CO₂付加体を形成します。金属-CO₂付加体は溶液のプロトン濃度に依存して金属-C(O)OHと金属-CO錯体と平衡混合物で存在します。強い還元条件下では中心金属に過剰の電子の蓄積が起こり易く

参考文献

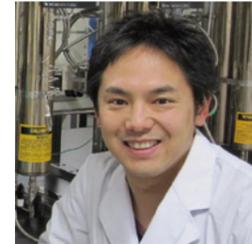
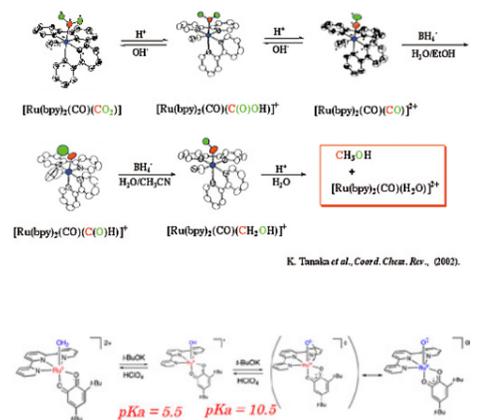
- 1) T. Fukushima, E. Fujita, J. Muckerman, E. Domitry, T. Wada, K. Tanaka "Photochemical Stereospecific Hydrogenation of a Ru Complex with an NAD⁺/NADH Type Liogand.," *Inorg. Chem.*, **48**, 11510 (2010).
- 2) T. Fukushima, T. Wada, H. Ohtsu, and K. Tanaka, "Photoinduced Four- and Six-electron Reduction of Mononuclear Ruthenium Complexes having NAD⁺ Analogous Ligand," *Dalton Trans.*, **39**, 11526 (2010)
- 3) K. Tanaka, "Metal Catalyzed Reversible Conversion between Chemical and Electrical Energy Intended to Construct a Sustainable Society," *Chemical Record*, **9**, 169 (2009)

金属-CO結合の還元的切断が起こり(CO発生)、低原子価金属錯体を再生します。私たちは再生不可の無機ヒドリド試薬ではなく再生可能なNADH型配位子の開発を行い、CO₂由来の金属-CO基の還元反応を有機ヒドリド試薬で行いメタノール等の有機化合物へ触媒的に変換することを目指しています。

酸化還元活性な有機配位子を持つアqua金属錯体ではアqua錯体のプロトン解離で生じる負電荷を配位子に収容させることが可能です。プロトン濃度変化でアqua金属錯体がプロトン解離を起こすと、自発的に還元型の配位子が形成され外部回路に直接、電気エネルギーを取り出すことが可能となります。その結果、アqua金属錯体由来のオキシルラジカル錯体の酸化型が形成され、有機化合物の脱水素反応および水の4電子酸化反応(酸素発生)を触媒します。

私たちは金属錯体の配位子の酸化還元反応を駆動力とする再生可能な有機ヒドリド試薬の開発ならびにアqua金属錯体由来のオキシルラジカル錯体による有機化合物の酸化反応の開発により、物質循環に共役したエネルギー変換反応の発展に大きな貢献をすると信じております。

Stoichiometric Conversion from CO₂ to CH₃OH on Ru



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かけ「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qua配位子(H₂O)を1つだけもつ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

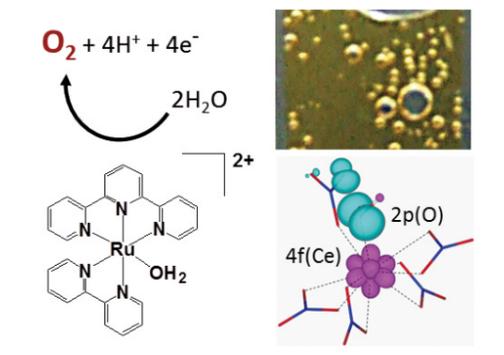
参考文献

- 1) M. Yoshida, S. Masaoka, J. Abe and K. Sakai, "Catalysis of Mononuclear Aquaruthenium Complexes in Oxygen Evolution from Water: A New Radical Coupling Path using Hydroxocerium (IV) Species," *Chem. Asian J.*, **5**, 2369-2378 (2010).
- 2) S. Masaoka, Y. Mukawa and K. Sakai, "Frontier Orbital Engineering of Photo-Hydrogen-Evolving Molecular Devices: a Clear Relationship Between the H₂-Evolving Activity and the Energy Level of the LUMO," *Dalton Trans.*, 5868-5876 (2010).
- 3) K. Yamauchi, S. Masaoka and K. Sakai, "Evidence for Pt(II)-Based Molecular Catalysis in the Thermal Reduction of Water into Molecular Hydrogen," *J. Am. Chem. Soc.*, **131**, 8404-8406 (2009).
- 4) S. Masaoka and K. Sakai, "Clear Evidence Showing the Robustness of a Highly Active Oxygen-Evolving Mononuclear Ruthenium Complex with an Aqua Ligand," *Chem. Lett.*, **38**, 182-183 (2009).

く、酸素発生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なっています。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。

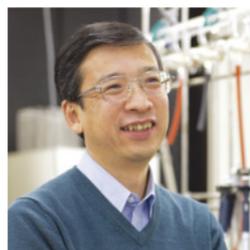
我々の研究グループでは、上記の酸化側の研究に加え、貯蔵可能エネルギーを作り出すための還元側の研究にも精力的に取り組んでいます。最近では、水溶液中、高い水素発生触媒能を有する鉄錯体触媒の開発にも成功しています。現在も、金属錯体を基盤材料とする人工光合成システムの開発を目指し、日夜研究を続けています。



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。

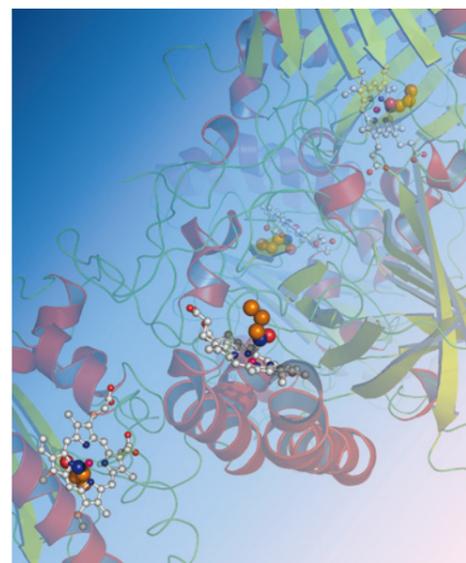
金属タンパク質の活性中心は、単純な単核金属イオンではなく、無機化学および錯体化学的観点からみても特異な構造を有している場合も多くみられます。このような特徴的な構造を有した遷移金属含有活性中心は、構造的に特異な性質を示すのみならず、機能的にも特異な性質を示し、生物無機化学の研究対象として非常に興味深いものです。我々の研究グループでは、このような金属タンパク質の中でも特に、これまでにない新規な機能を有する金属タンパク質として、酸素や一酸化炭素といった気体分子のセンサーとして機能する一連のセンサータンパク質を対象として研究を進めています。

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。

参考文献

- 1) "Molecular oxygen regulates the enzymatic activity of a heme-containing diguanylate cyclase (HemDGC) for the synthesis of cyclic di-GMP" H. Sawai, S. Yoshioka, T. Uchida, M. Hyodo, Y. Hayakawa, K. Ishimori, S. Aono, *Biochim. Biophys. Acta - Proteins and Proteomics*, **1804**, 166-172 (2010)
- 2) "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)
- 3) "Metal-containing sensor proteins sensing diatomic gas molecules" S. Aono, *Dalton Trans.*, 3137-3146 (2008)
- 4) "Crystal structure of CO-sensing transcription activator CooA bound to exogenous ligand imidazole" H. Komori, S. Inagaki, S. Yoshioka, S. Aono, Y. Higuchi, *J. Mol. Biol.*, **367**, 864-871 (2007)



新規なヘム酵素OxdREの構造(一部):分子中のヘム(ball & stick modelで表示)に基質であるアルドキシム(ball modelで表示)が結合している。

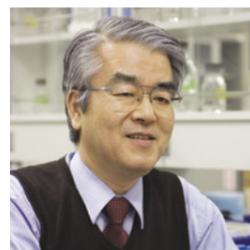
〈キーワード〉

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



桑島 邦博 (教授)

1971年北海道大学理学部高分子学科卒業、理学博士(北海道大学)。北海道大学理学部教務職員、スタンフォード大学博士研究員(NIH奨励研究員)、北海道大学理学部助手、東京大学理学部物理学教室(1993年より東京大学・大学院理学系研究科物理学専攻)助教授、同教授を経て2007年1月より現職。
TEL: 0564-59-5230
FAX: 0564-59-5234
mail: kuwajima@ims.ac.jp

〈キーワード〉

蛋白質

フォールディング

構造形成

分子シャペロン

■生体分子機能研究部門

蛋白質の天然三次元構造が作られる仕組みを探る

蛋白質の天然立体構造はその特異的なアミノ酸配列によりもたらされます。生命現象を担う蛋白質のこのような特性は、生物の40億年の進化の歴史を通して作り上げられました。しかし、同時に、蛋白質の立体構造形成(フォールディング)は、熱力学原理に基づく物理化学的過程でもあり、蛋白質のフォールディング機構の解明は、生命現象と物理化学現象の接点を担う、生物物理学の最も根元的な課題の一つです。このような立場から、私たちは、(1)試験管内での蛋白質巻き戻り機構の解析、(2)蛋白質のフォールディングに関わる分子シャペロンの作用機構の解析を行っています。これらの研究を達成するため、NMRを始めとする各種分光学的測定法、熱的測定法などの物理的測定手段とともに、遺伝子操作実験などの分子生物学的手法も用いています。

蛋白質のほどけた状態からの巻き戻り反応巻き戻り反応の速度過程を、光吸収、蛍光、円二色性、X線溶解散乱などのさまざまな構造プローブを用いて追跡することにより、構造形成を直接観測することができます。高分解能NMR装置を用いて、蛋白質巻き戻り中間体の原子レベルにおける立体構造解析を行っています。リゾチーム、ラクトアルブミン、ヌクレアーゼ、緑色蛍光蛋白質などの代表的な球状蛋白質をモデルとして用いています。コンピュータを用いて水溶液中での蛋白質のアンフォールディング(構造破壊)過程の分子動力学シミュレーションも行って

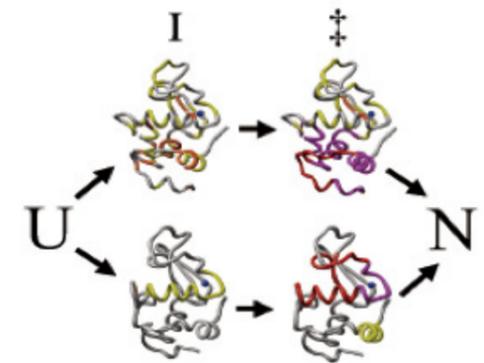
参考文献

- 1) T. Inobe, K. Takahashi, K. Maki, S. Enoki, K. Kamagata, A. Kadooka, M. Arai and K. Kuwajima, "Asymmetry of the GroEL-GroES complex under physiological conditions as revealed by small-angle X-ray scattering," *Biophys. J.* **94**, 1392-1402 (2008).
- 2) K. Kuwajima, T. Oroguchi, T. Nakamura, M. Ikeguchi and A. Kidera, "Experimental and Simulation Studies of the Folding/Unfolding of Goat α -Lactalbumin," *In Water and Biomolecules--Physical Chemistry of Life Phenomena*, (Eds. K. Kuwajima, Y. Goto, F. Hirata, M. Kataoka and M. Terazima), pp. 13-35, Springer-Verlag, Berlin Heiderberg (2009).
- 3) T. Nakamura, K. Makabe, K. Tomoyori, K. Maki, A. Mukaiyama and K. Kuwajima, "Different folding pathways taken by highly homologous proteins, goat α -lactalbumin and canine milk lysozyme," *J. Mol. Biol.* **396**, 1361-1378 (2010).

ールディングの分子機構を原子レベルの詳細で曖昧性なしに議論することが可能となりつつあります。

蛋白質のフォールディング問題は、人のさまざまな病気とも関連していることが明らかとなっています。アルツハイマー病やプリオン病のような神経変性疾患は、蛋白質が間違っって構造形成したために病原性を持った蛋白質会合体が作られることによってもたらされます。人の癌の多くも、p53とよばれる癌抑制蛋白質が間違っって構造形成したためにもたらされることが明らかとなっています。このように、蛋白質のフォールディング問題の解明は、最終的には、人のさまざまな病気の克服にもつながる可能性を秘めています。

細胞内には蛋白質の絡み合いを防ぎ構造形成を助ける蛋白質(分子シャペロン)が存在します。分子シャペロンの作用機構は、蛋白質のフォールディングと細胞生物学的な現象を結びつける重要な問題です。大腸菌の分子シャペロンであるシャペロニン GroEL/ESの作用機構を明らかとするため、試験管内での蛋白質巻き戻りの速度過程に及ぼすシャペロニンの影響を物理化学的立場から研究しています。シャペロニンの機能発現に必須なATPなどのヌクレオチドの結合反応、ヌクレオチド結合に伴うGroELのアロステリック転移、シャペロニンの標的蛋白質との結合反応の熱力学的解析と速度論的解析に取り組んでいます。これらは、細胞生物学と生物物理学との接点を担う新しい研究として注目されています。



巻き戻り反応の速度論的解析から明らかとなった、相同蛋白質であるヤギ α -ラクトアルブミン(下)とイヌ・乳リゾチーム(上)のフォールディング経路(中村等 *J. Mol. Biol.* **396**, 1361-1378 (2010))。



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
立大学大学院薬学研究所教授
を経て2008年4月より現職。
TEL: 0564-59-5225
FAX: 0564-59-5224
mail: kkatonmr@ims.ac.jp

<キーワード>

糖鎖

タンパク質

NMR

動的3次元構造

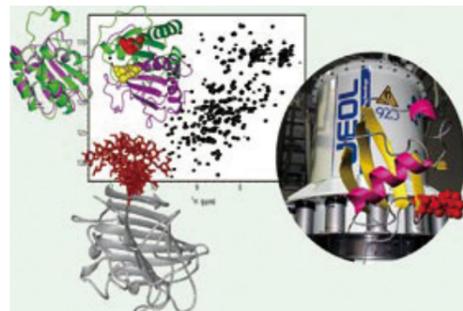
■生体分子機能研究部門 超高磁場NMRを機軸とする生命分子のダイナミクスの探究

生命体を構成する多種多様な高分子は、長い進化の過程を経て複雑で精緻な3次元構造を獲得し、これにより厳密にして柔軟な分子認識能、効率的かつ特異的な触媒能など、生命活動を支える高度な機能を実現しています。生命分子の多くは、特異的な分子間相互作用を介して超分子マシーナリーを形成して固有の機能を発揮しています。こうしたマシーナリーを構成するそれぞれの生命分子は、さまざまな時間スケール、空間的スケールにおける分子運動を体現しています。したがって、高次生体機能の発現メカニズムを分子レベルで理解するためには、生命分子およびその集合系の高次構造とダイナミクスを詳細に解明することが必要です。

例えば、私たちが主要な研究対象としている“糖鎖”は、核酸・タンパク質に次ぐ第3の生命鎖とよばれており、タンパク質や脂質に結合した複合糖質として、生命現象のさまざまな局面で重要な働きをしています。糖鎖は、細胞の表層で超分子クラスターを形成して分子認識の舞台を構

築し、これにより細胞間のコミュニケーションを媒介する機能を担っています。また、糖鎖はタンパク質分子を修飾することにより、それらの高次機能の制御と生体内運命の決定に寄与していることが明らかとなりつつあります。しかしながら、糖鎖は、化学構造が不均一であることに加えて内部運動の自由度が大きいため、これまで分子科学的なアプローチを行うことが困難でした。

私たちは、超高磁場核磁気共鳴(NMR)を利用して、タンパク質・複合糖質あるいはそれらの超分子複合体の原子レベルの立体構造・ダイナミクスの精密解析を基盤とする生命分子科学研究に取り組んでいます。特に、糖鎖とタンパク質のダイナミックな構造と生物学的な機能発現メカニズムを分子科学の観点から統合的に理解することを目指しています。そのために、私たちのグループでは、分子分光学に加えて、分子生物学、細胞生物学、ナノサイエンスによる多面的な生命分子へのアプローチを展開しています。



920MHz超高磁場NMR分光法を利用してタンパク質・複合糖質の3次元構造・ダイナミクス・相互作用を原子レベルの分解能で解明する。

参考文献

- 1) M.Yagi-Utsumi, K.Matsuo, K.Yanagisawa, K.Gekko, and K.Kato, "Spectroscopic characterization of intermolecular interaction of Aβ molecules promoted on GM1 micelles," *Int. J. Alzheimer's Dis.* **2011**, 925073 (2011).
- 2) K.Kato, Y.Yamaguchi, and Y.Arata, "Stable-isotope-assisted NMR approaches to glycoproteins using immunoglobulin G as a model system," *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* **56**, 346-359 (2010).
- 3) M.Nishio, Y.Kamiya, T.Mizushima, S.Wakatsuki, H.Sasakawa, K.Yamamoto, S.Uchiyama, M.Noda, A.R.McKay, K.Fukui, H.-P.Hauri, and K.Kato, "Structural basis for the cooperative interplay between the two causative gene products of combined factor V and factor VIII deficiency," *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **107**, 4034-4039 (2010).
- 4) O.Serve, Y.Kamiya, A.Maeno, M.Nakano, C.Murakami, H.Sasakawa, Y.Yamaguchi, T.Harada, E.Kurimoto, M.Utsumi-Yagi, T.Iguchi, K.Inaba, J.Kikuchi, O.Asami, T.Kajino, T.Oka, M.Nakasako, and K.Kato, "Redox-dependent domain rearrangement of protein disulfide isomerase coupled with exposure of its substrate-binding hydrophobic surface," *J. Mol. Biol.* **396**, 361-374 (2010).



藤井 浩(准教授)

1985年金沢大学工学部卒、
1990年京都大学大学院工学
研究科博士課程修了、工学博
士。北海道大学理学部助手、
Minnesota大学博士研究員、
山形県テクノポリス財団生物
ラジカル研究所主任研究員を
経て1998年3月より現職。
TEL: 0564-59-5578
FAX: 0564-59-5600
mail: hiro@ims.ac.jp

<キーワード>

金属酵素

反応機構

小分子活性化

磁気共鳴

■生体分子機能研究部門 金属酵素の機能発現の分子メカニズムの解明

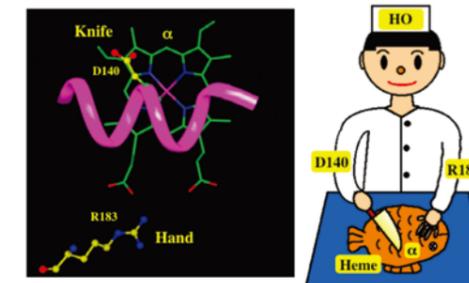
私たちの体の中にはたくさんの金属酵素と呼ばれるタンパク質が存在し、生命活動を支えています。金属酵素は、金属イオンを含む酵素を意味し、多くの場合、この金属イオンが酵素反応と直接関係しています。例えば、体中の鉄分が足りなくなると貧血を起こすのも、金属酵素(タンパク質)の関与するところ。私たちが必要とする金属イオンは、鉄、銅などわずか十数種類ですが、金属酵素が行う反応の種類は莫大な数になります。どうしてわずかな金属イオンからこんなにたくさん種類の反応ができるようになるのでしょうか?私たちの研究グループでは、この問題に答えるため金属酵素の機能がどのような機構で発現されているのかを分子レベルで研究しています。

現在私たちのグループでは、(1)酸素分子を活性化しさまざまな酸化反応を行う鉄イオンを含んだ酵素、(2)地球上の窒素循環サイクルに関わる

金属酵素をターゲットとして研究を進めています。酸素分子の活性化に関わる酵素としてこれまで、ヘムオキシゲナーゼやチトクロームP450などのヘム(鉄ポルフィリン錯体)を活性部位にもつヘム酵素の機能発現機構を研究してきました。現在は、これらの研究をさらにヘムを持たない非ヘム酵素に広げ研究を行っています。一方、窒素循環サイクルの金属酵素では、脱窒過程の中の亜硝酸還元酵素の研究を進めています。これら金属酵素の機能発現機構を研究する上で、金属イオンとそれを取り囲むタンパク質の役割、さらにはそれらの調和を解明することが大切だと考えています。そこで私たちの研究グループでは、金属イオンの動きを有機化学、錯体化学の知見を使って研究しています。またタンパク質の役割は、菌の培養や組み換え実験によるミュートーションなどの生化学的手法を使って研究しています。

参考文献

- 1) T. Kurahashi, M. Hada, and H. Fujii, "Critical Role of External Axial Ligands in Chirality Amplification of trans-Cyclohexane-1,2-diamine in Salen Complexes," *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 12394-12405 (2009).
- 2) A. Takahashi, T. Kurahashi, and H. Fujii, "Effect of Imidazole and Phenolate Axial Ligands on the Electronic Structure and Reactivity of Oxoiron(IV) Porphyrin π-Cation Radical Complexes: Drastic Increase in Oxo-Transfer and Hydrogen Abstraction Reactivities," *Inorg. Chem.* **48**, 2614-2625 (2009).
- 3) M. Kujime, C. Izumi, M. Tomura, M. Hada, and H. Fujii "Effect of a Tridentate Ligand on the Structure, Electronic Structure, and Reactivity of the Copper(I) Nitrite Complex: Role of the Conserved Three-Histidine Ligand Environment of the Type-2 Copper Site in Copper-Containing Nitrite Reductases" *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 6088-6098 (2008).
- 4) M. Kujime and H. Fujii "Spectroscopic Characterization of Reaction Intermediates in Nitrite Reduction of Copper(I) Nitrite Complex as a Reaction Model for Copper Nitrite Reductase" *Angew. Chemie. Int. Ed.* **45**, 1089-1092 (2006).



ヘムオキシゲナーゼの機能発現機構。

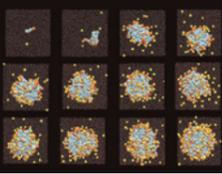
文部科学省 最先端・高性能汎用スーパーコンピュータ の開発利用・次世代ナノ統合 シミュレーションソフトウェアの研究開発

―― ナノ分野グランドチャレンジ ――

分子科学研究所は、平成18年度に始まった文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトのアプリケーション開発拠点(ナノ分野)として研究を推進しています。私どもは、本プロジェクトにおけるナノ分野のグランドチャレンジとして、将来の社会や科学技術基盤を支える重要な要素となり得る次の3つの領域に取り組んでいます。(1)太陽エネルギー等の「次世代エネルギー」、(2)難病克服につながる「次世代ナノ生体物質」、(3)分子デバイスなどの「次世代情報機能・材料」。これらの領域において、触媒(酵素)などナノスケールで機能が発現する物質の開発と物性の解明を可能とするために、次世代スーパーコンピュータを駆使する新しい計算科学の方法論やソフトウェアの開発を行います。

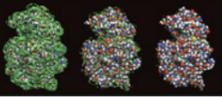
[次世代ナノ情報機能・材料]

[次世代ナノ生体物質]

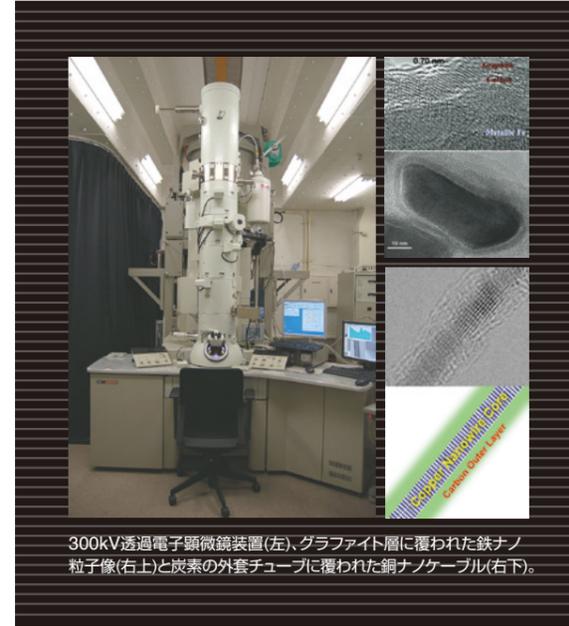


ドラッグデリバリー
(ミセルの分子動力学)

[次世代エネルギー]



タンパク質の周りの水の分布
(3D-RISMによって検出)



300kV透過電子顕微鏡装置(左)、グラファイト層に覆われた鉄ナノ粒子像(右上)と炭素の外殻チューブに覆われた銅ナノケーブル(右下)。

文部科学省先端研究施設 共用イノベーション創出事業ナノテクノロジー・ネットワーク 中部地区ナノテク総合支援: ナノ材料創製加工と先端機器分析

本プロジェクト(平成19~23年度)では、分子科学研究所が中核機関となつて、国立大学法人・名古屋大学、国立大学法人・名古屋工業大学、学校法人・豊田工業大学の愛知県内3機関と連携することにより、中部地区ナノテクノロジー総合支援拠点を形成しています。ナノ計測・分析、超微細加工、分子・物質合成の3領域において、最先端ナノ計測機器の利用支援、有機・生体関連分子等の多彩な物質群の設計合成評価支援、最先端設備技術による半導体超微細加工支援等を総合的に実施しています。各要素単体の支援に留まらず、4機関の特徴を活かした連携融合支援を推進します。



アト秒精度のコヒーレント制御実験。

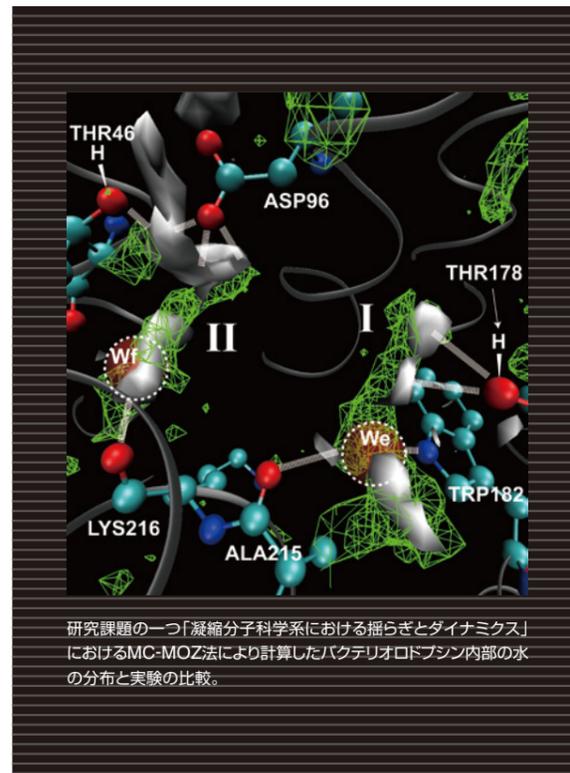
エクストリームフォトニクス

植物における光合成をはじめとして、光と分子との関わりは私達の身近な自然の中で重要な役割を果たしています。そこで、ナノサイエンスから生命科学などの様々な分野に新たな方法論を提供し、光分子科学をさらに進展させるために「光を造る」、「光で観る」、「光で制御する」という観点から、理化学研究所と連携して本プロジェクトを遂行しています。研究の柱としては、新しいコヒーレント光源の開発、新しい顕微分光法の開発、光位相の精密制御による物質波のマニピュレーションや化学反応制御の研究があります。

文部科学省 「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の構築」 HPCI戦略プログラム 分野2 「新物質・エネルギー創成」

HPCI戦略プログラムは、次世代スーパーコンピュータ「京」を利用して研究を推進するものです。戦略分野2では、東京大学物性研究所、分子科学研究所、東北大学金属材料研究所の3つが戦略機関として採択され、「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、2010年9月からプロジェクトが始まりました。この戦略機関としての活動を推進するため、物性科学、分子科学、材料科学の計算科学が融合した新しいコミュニティ「計算物質科学イニシアティブ(CMSI)」が発足しました。

分子研は、戦略機関として他の2研究所と密接に連携・協力して物質科学の新たな展開を図っていくため、「計算分子科学研究拠点(TCCI)」を設置し、これにより、研究推進の他、研究支援、人材育成、スパコン連携等の分野固有の問題について積極的に活動を展開していく予定です。2010年度は準備研究を行い、2011年度から研究の本格化に向けた活動を開始しております。

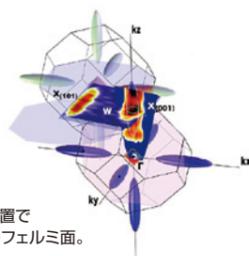


大学連携研究設備ネットワークの構築

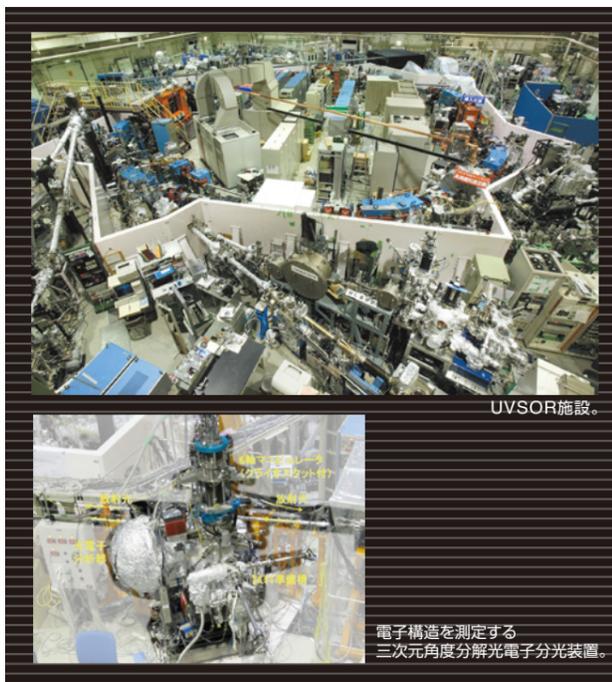
全国の研究者が色々な大学の設備を、インターネットを通じて有効に活用出来るようにするために、「化学系研究設備有効活用ネットワークの構築」が平成19年度よりスタートしました。平成22年度からは、「大学連携研究設備ネットワークによる設備相互利用と共同研究の促進」として、体制が整えられています。本ネットワークには、全国の大学や企業を含めた79の機関が参加しており、300台以上の研究設備が相互利用のために公開されています。7000名近い研究者がユーザーとして登録されており、毎月5000件以上の利用実績があります。宅急便による依頼計測も可能であり、有効に活用されています。

極端紫外光研究施設 (UVSOR)

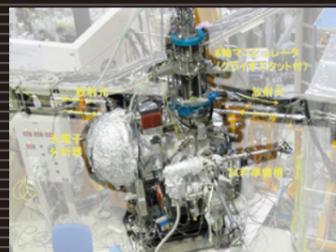
光は、その波長によって、赤外線、可視光線、紫外線、極端紫外線、X線、と様々な名前と呼ばれます。この様々な波長域の光を一度に出すことのできる装置がシンクロtron光源です。高エネルギーの電子ビームが高磁場で発するシンクロtron光は、あらゆる波長域において高強度で指向性が高く、分子科学を始め幅広い研究分野で利用されています。分子科学研究所の極端紫外光研究施設は1983年に稼働を始めたシンクロtron光源ですが、幾度かの改良を経て、現在でも、極端紫外線から赤外線・テラヘルツ波に至る低エネルギーのシンクロtron光源として世界最高水準の高輝度性を誇っています。その特性を活かして、物質の機能性の起原で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。



三次元角度分解光電子分光装置で得られた固体試料(CeSb)のフェルミ面。



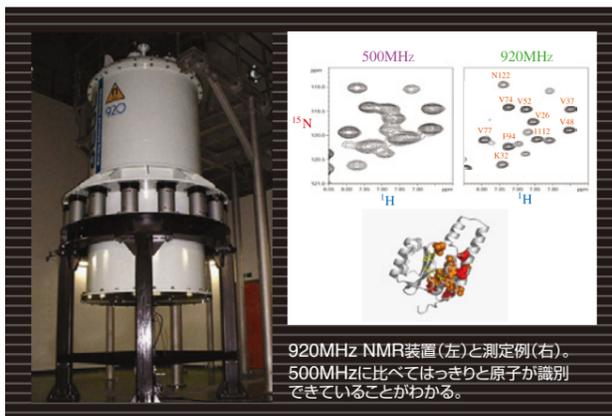
UVSOR施設。



電子構造を測定する三次元角度分解光電子分光装置。

分子スケールナノサイエンスセンター

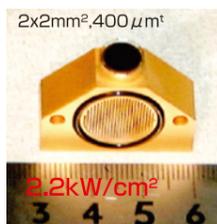
化学のフロンティアである「分子スケールナノサイエンス」を集中的に研究推進するセンターとして2002年に発足しました。1つの専任部門、2つの併任部門から構成されており、新規分子・ナノ構造体の作成から、特異な化学反応や物理化学的性質を体系的に研究する組織になっています。世界最高性能を誇る920MHz核磁気共鳴(NMR)装置を共同利用に供している他、19年度より始まったナノテクノロジーネットワークプロジェクトを担当し、多くのナノサイエンス関連支援プログラムを提供しています。



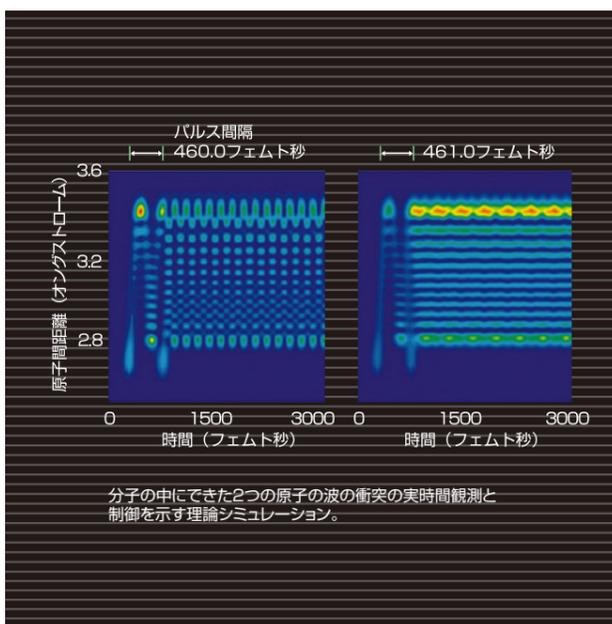
920MHz NMR装置(左)と測定例(右)。500MHzに比べてはっきりと原子が識別できていることがわかる。

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なう施設です。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。



当センターで開発した手のひらサイズの高輝度レーザー光源。



分子の中にできた2つの原子の波の衝突の実時間観測と制御を示す理論シミュレーション。

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。その他、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。



CCD単結晶X線解析計。



高周波・高磁場電子スピンの共鳴装置。

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、ガラス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。



精密ミクロ加工装置。

高速加熱・ジナル機構付きホットエンボスシステム。

岡崎共通研究施設

計算科学研究センター

我が国唯一の分子科学計算のための共同利用基盤センターとして、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18年度導入の「超高速分子シミュレータ」に加え、平成19年度はさらに「高性能分子シミュレータ」を導入し、格段に大規模な計算が実行できる環境を提供しています。



超高速分子シミュレータ。

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。分子科学研究所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。

