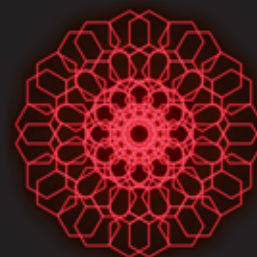
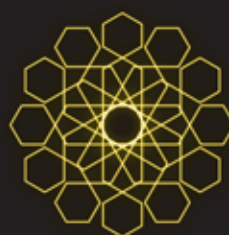
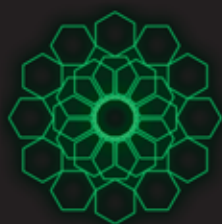
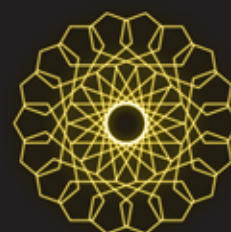
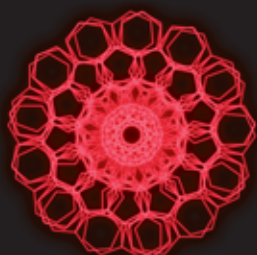
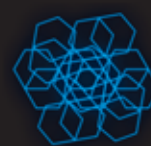
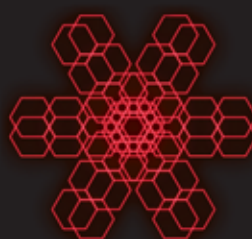


NATIONAL INSTITUTES OF NATURAL SCIENCES  
IMS [Institute for Molecular Science]

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





分子は物質の基本構成単位であり、物質の示す性質や機能を担う根源です。物質の機能を深く知り、これを高度に利用するためには、原子・分子レベルで物質を理解すること、さらには、分子から構成されるシステムの階層を超えた機能を理解することが不可欠です。分子科学は、分子の持つ特性と機能を物理及び化学的手法で体系づけようとする物理学と化学の境界領域の科学で、その対象は個々の分子から宇宙・生命科学まで広い範囲にわたります。分子科学研究所は設立以来40年以上にわたり、研究の中核拠点として、実験研究と理論研究の両面から我が国の分子科学分野を先導する研究に関与してきました。その背景には、関連研究分野の研究者コミュニティの支持が不可欠であり、総合的な共同利用研究所としての機能を維持するには、今後も関連研究者の共同研究の場、研究者の交流や国際学術交流の場を提供すること、さらには、専門的な基盤に立つ高度の研究者の養成のミッションを継続して、国際的な研究センターとしての機能を維持し続けることが分子科学研究所の使命です。

平成29年度からの分子科学研究所は、光分子科学研究領域、物質分子科学研究領域、生命・錯体分子科学研究領域として、理論・計算分子科学研究領域の4研究領域と、それらを繋ぐ

## 分子と対話し、その豊かな知恵を活かす

協奏分子システム研究センターに、新たにメゾスコピック計測研究センターを加えて4つの領域と2つの研究センターが研究基盤を構成し、それに極端紫外光研究施設(UVSOR)をはじめとする5つの研究施設を擁し、分子の構造と反応そして機能に関する基礎研究を推進しています。分子科学研究所は常に、分子科学の新たな研究分野を拓く挑戦を続けてきました。岡崎3研究所の力を結集した岡崎統合バイオサイエンスセンター、先端計測手法の開発を含む分子スケールナノサイエンスセンターや分子制御レーザー開発研究センターは新たな研究分野の基軸となる計測手法の開発にも大いに貢献してきました。分子科学研究所は、学術研究の基本を踏まえ、科学分野を先導する研究を推進し、新しい科学領域を拓く挑戦を続けていきます。その意味でも、新たな計測手法の開発と普及は大事なミッションです。今年度から分子制御レーザー開発研究センターを改組して、メゾスコピック計測研究センターを発足させました。分子システムの時代を先導する新たな挑戦です。

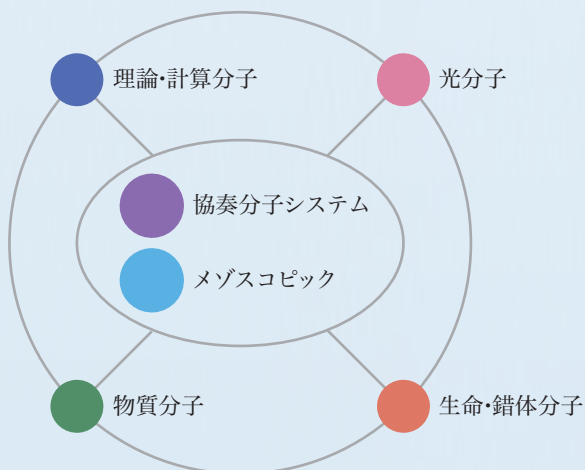
分子科学の世界的なCenter of Excellenceとして、分子科学研究所は世界の人材循環の要として、これからも発展し続けることを目指します。

自然科学研究機構・分子科学研究所  
所長 川合 真紀





## 分子科学研究所とは

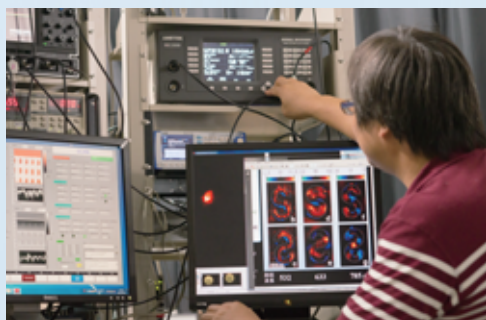


分子を調べることは、分子を構成単位とする物質や生命への理解を深めることに他なりません。分子科学研究所は、分子を軸足に置いた科学を展開する中核的研究拠点として、1975年に愛知県岡崎市に設立された大学共同利用機関です。2004年より自然科学研究機構を構成する5つの研究機関の1つとして、ミッション※達成に向けて研究所全体が一丸となって、日々研究に取り組んでいます。

※豊かな自然において多様な物質循環、エネルギー変換を司っている「分子」についての知識を深め、卓越した機能をもつ分子系を創成すること。

国際的な中核共同研究センターとして、国内外の分子科学研究を先導すると同時に、生命科学・天文科学などをふくむ分子が関与する広汎な関連分野の研究者と協同して、科学の新たな研究領域を創出すること。

## 大学共同利用機関として



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

## 若手研究者の育成



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

# 卓越した機能を持つ分子系を創成すること 「分子」についての知識を深め、

分子科学研究所では、理論・計算分子科学、光分子科学、物質分子科学、および、生命・錯体分子科学という4つの大きな研究領域で教授もしくは准教授の独立した研究グループが互いにゆるやかに連携を取りながら、自由な発想に基づいて世界最先端の研究を進めています。また、協奏分子システム研究センターとメゾスコピック計測研究センターはこの4研究領域での成果を統合するとともに4研究領域に新たな方法論を提供し、新しい学際的分野を切り拓く使命を担っています。

## 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様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。

## 協奏分子システム研究センター

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

## メゾスコピック計測研究センター

新しい計測で分子システムのありのままの姿を解析  
分子が集まって機能するシステムでは、マイクロとマクロを繋ぐ階層間の情報・物質のやりとりがその特性発現に役割を担っていると考えられます。その現場をできる限りありのままの姿で捉え、新しい分子の能力を引き出すための極限的計測法の研究を行います。



■理論分子科学第一研究部門

凝縮系における階層的ダイナミクスの理論研究



齊藤 真司(教授)

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

TEL: 0564-55-7300

mail: shinji@ims.ac.jp

〈キーワード〉

揺らぎ・緩和



不均一性



階層的動力学



多次元解析

水の特異的な熱力学的性質、光合成系の高速なエネルギー移動の起源、タンパク質における機能発現機構などはどのように生まれるのでしょうか？

溶液や生体分子などの系では、フェムト秒オーダーの分子振動から、マイクロ秒からミリ秒さらに遅い時間スケールにいたる集団運動やタンパク質の構造の変化が存在します。このような階層的な運動は幅広い時間スケールを持っているだけでなく、それぞれの運動の空間スケールも異なっています。光などの外部摂動による分子の電子状態変化によっても、このような時間的・空間的に不均一な運動が誘起され、集団的な構造変化や化学反応にいたることもあります。そして、このような熱的および非熱的な電子や分子動力学による状態の変化の結果として、溶液や生体分子系は複雑に変化し、様々な物性や機能の発現につながっていると考えられます。私達は統計力学や量子力学に基づく独自の理論計算・解析手法を開発し、以下の理論的・計算科学的研究を展開しています。

光を利用することにより、系の運動の時間(エネルギー)スケールや変化を調べることが可能となります。しかも、高度に制御された複数の光を用いること(これを高次非線形分光法と呼びます)により、複雑な運動の絡み合いやエネルギーがどのように緩和するかを解明することが可能となります。私達は、高次非線形分光法の理論的背景を明らかにし、その第一原理的計算手法の開発を世界に先駆

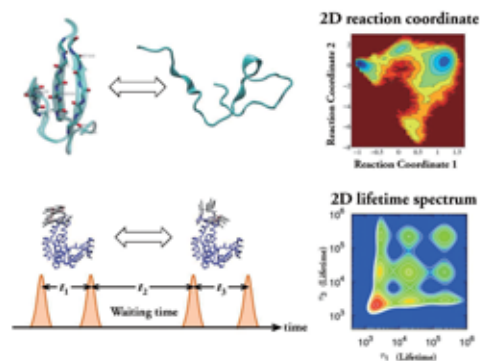
けて行いました。また、水の分子内・分子間運動の三次赤外分光法に関する理論計算を行い、水の最も重要な動的特徴である超高速エネルギー緩和の起源を明らかにしてきました。

私達は、高次非線形分光法の理論的考え方を超高速動力学の解析だけでなく、不均一な運動や複数の運動間の動的カップリングの解析にも展開できることを見出しました。そこで、過冷却液体の時間的・空間的不均一動力学の起源についても研究を展開し、様々な過冷却液体に対する多時間相関関数に関する系統的な解析から動的不均一性の寿命と揺らぎの関係を明らかにしました。さらに、様々な時間スケールの階層的な構造揺らぎがどのようにカップルし構造変化が起こっているかを解き明かす手法を開発しました。この考えをさらに展開することにより、機能発現の分子論的起源の理解につながると期待しています。以上の研究に加え、タンパク質における遅い化学反応の起源、水の特異的な熱力学的性質の動力学的起源、動力学情報に基づく反応座標の抽出、光合成系の効率的なエネルギー移動における時間相関の解明などにも取り組んでいます。

このように、凝縮系における様々な時空間スケールをもつ階層的な揺らぎの中から、どのように状態変化や反応が引き起こされ、物性や機能が発現するのかという多体分子系の基本的な疑問の解明、さらには、新しい物性・機能発現の指導原理の獲得をめざした理論研究を行っています。

参考文献

- 1) T. Yagasaki and S. Saito, "Fluctuations and Relaxation Dynamics of Liquid Water Revealed by Linear and Nonlinear Spectroscopy," *Annu. Rev. Phys. Chem.* **64**, 55-75 (2013).
- 2) K. Kim and S. Saito, "Multiple Length and Time Scales of Dynamic Heterogeneities in Model Glass-Forming Liquids: A Systematic Analysis of Multi-Point and Multi-Time Correlations," *J. Chem. Phys.* (Special Topic: Glass Transition) **138**, 12A506 (13 pages) (2013).
- 3) T. Mori and S. Saito, "Dynamic Heterogeneity in the Folding/ Unfolding Transitions of F1P35," *J. Chem. Phys.* **142**, 135101 (7pages) (2015).
- 4) J. Ono, S. Takada, and S. Saito, "Couplings between Hierarchical Conformational Dynamics from Multi-Time Correlation Functions and Two-Dimensional Lifetime Spectra: Application to Adenylate Kinase," *J. Chem. Phys.* (Special Topic: Multidimensional Spectroscopy) **142**, 212404 (13 pages) (2015).



(上)長時間の分子シミュレーションから抽出した動的な情報から決定したタンパク質の構造変化に関する反応座標と自由エネルギー面。(下)多時間相関関数の解析から明らかにされた階層的な時間スケールを持つ構造揺らぎ間の動的カップリング。

## ■理論分子科学第一研究部門

### ナノ構造体の光応答理論と光高機能物質理論設計への展開



#### 信定 克幸(准教授)

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

TEL: 0564-55-7311

FAX: 0564-53-4660

mail: nobusada@ims.ac.jp

光(電磁場)と物質の相互作用は非常に多くの研究領域で極めて重要な現象であり、分子科学の根幹を成している現象であると言っても過言ではありません。身近な例では、物には色が付いており、その色が認識できること、その色が褪せていくこと、新しい物質を生み出す反応が起こること、また光合成などにも強く関係しています。更には物質の構造や性質を理解するための分光学、太陽電池や光触媒反応、光デバイス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簡便な近似を使って議論されてきました。この近似においては、光は空間的に変動のない“のっぺりした一様な”外場として扱われ、更には物質系(電子系)の運動の結果生じる新しい電磁場と電子が再帰的に相互作用する効果(自己無撞着性)も考慮に入れていません。ところが、最近のナノテクノロジーの進展は目覚ましいものがあり、十数ナノメートルオーダー以下の極めて精巧な物質が作られるようになり、またそのような物質に新たな機能を持たせる試みが盛んに行われています。このような状況下では、もはや光と物質の相互作用の非一様性や自己無撞着性が無視できなくなり、双極子近似の妥当性は脆くも崩れ去ります。それ故に双極子近似を超えた光応答理論の

開発が必要になってきます。そこで我々のグループでは、ナノ構造体と光の相互作用をより正確に扱う為の光応答理論の開発とその理論に基づく数値計算手法の開発を行い、高い光機能を持った物質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。

我々はこれまでに、光の非一様性と自己無撞着性を取り込んだ理論の開発及びその理論に基づく計算手法の開発を行ってきました。具体的には、金属クラスター、量子ドット、半導体薄膜・バルクを対象として、従前のレーザー光励起とは本質的に異なる光励起ダイナミクスが、光の非一様性と自己無撞着性に起因して引き起こされることを示しました。冒頭で説明したように、光励起ダイナミクスは高い機能を持った物質の設計に極めて密接に関係しています。そこでこの新しい光励起ダイナミクスの基礎理学的知見を光高機能物質設計へ展開する研究も同時に進めています。実在系機能物質を理論的・計算科学的な観点から設計するためには、その目的に耐えうる新しい計算手法の開発が必要となってきます。物質(電子系)の運動と光(電磁場)の運動を同時に扱うための超大規模並列計算プログラムの開発にも成功しました。実在系ナノ構造体の光励起ダイナミクスとしては、世界最大規模の計算を実行することが可能であり、神戸理研の「京」コンピュータを使った計算を進めています。

#### 参考文献

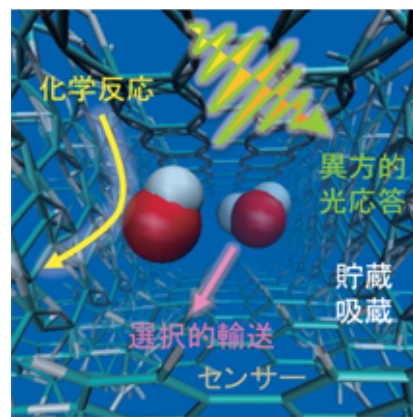
- 1) K. Iida, M. Noda and K. Nobusada, "Development of Theoretical Approach for Describing Electronic Properties of Hetero-Interface Systems under Applied Bias Voltage", *J. Chem. Phys.* **146**, 084706 (2017).
- 2) K. Koizumi, K. Nobusada and M. Boero, "Simple but efficient method for inhibiting sintering and aggregation of catalytic Pt nanoclusters on metal-oxide supports", *Chem. Eur. J.* **23**, 1531 (2017).
- 3) M. Yamaguchi and K. Nobusada, "Large Hyperpolarizabilities of the Second Harmonic Generation Induced by Nonuniform Optical Near Fields", *J. Phys. Chem. C* **120**, 23748 (2016).
- 4) M. Noda, K. Ishimura, K. Nobusada, K. Yabana and T. Boku, "Massively-Parallel Electron Dynamics Calculations in Real-time and Real-Space: Toward Applications to Nanostructures of more than Ten-Nanometers in Size", *J. Comp. Phys.* **265**, 145 (2014).

〈キーワード〉

ナノ構造体

光・電子融合ダイナミクス

光高機能物質



ナノ構造体の局所領域で起こる  
光励起電子・核ダイナミクスの概念図



## ■理論分子科学第一研究部門 新しい多電子理論と化学への応用



柳井 毅(准教授)

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

TEL: 0564-55-7301

FAX: 0564-53-4660

mail: yanait@ims.ac.jp

<キーワード>

電子状態理論

計算化学

擬縮重電子系

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法は実験研究者にも広く利用されています。しかしながら、大きな分子の複雑な電子状態(励起状態や金属化合物の擬縮

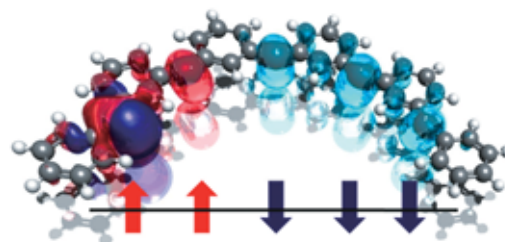
重状態、多参照状態)に関する計算の実現には、今なお大きな壁があります。この難しさに対して、我々は最先端の理論やアルゴリズムを駆使あるいは考案し、これまで解析できなかった電子状態を解明する研究を世界に先駆けて進めています。

例えば、共役 $\pi$ 分子の励起状態やあるスピン状態には、従来の一電子的な描像では理解できない電子状態があり、それらが重要な種々の現象に関与することが知られています。我々は、磁性有機分子の典型系や、最近注目を浴びているグラフェンナノリボンの電子状態を高精度に解析することができています。グラフェンはエッジの形状に起因する特異的な電子構造の上で、 $\pi$ 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イ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。

### 参考文献

- 1) W. Mizukami, Y. Kurashige, T. Yanai, "More  $n$  Electrons Make a Difference: Emergence of Many Radicals on Graphene Nanoribbons Studied by Ab Initio DMRG Theory," *J. Chem. Theo. Comp.* **9**, 401-407 (2012).
- 2) Y. Kurashige, G. K-L. Chan, and T. Yanai, "Entangled quantum electronic wavefunctions of the  $Mn_4CaO_5$  cluster in photosystem II," *Nature Chem.* **5**, 660-666 (2013).
- 3) M. Saitow, Y. Kurashige, and T. Yanai, "Highly scalable multireference configuration interaction theory with internal contraction of density matrix renormalization group wave function," *J. Chem. Phys.* **139**, 044118 (15 pages) (2013).



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 凝縮相における化学動力学の理論



石崎 章仁(教授)

2008年京都大学大学院理学研究科博士課程修了、博士(理学)。2008年カリフォルニア大学バークレー校化学部化学科にて日本学術振興会海外特別研究員、2010年ローレンス・バークレー国立研究所物理生物科学部門博士研究員、2012年3月分子科学研究所特任准教授を経て、2016年4月より現職。2016年名古屋大学大学院理学研究科客員教授兼任。

TEL: 0564-55-7310

FAX: 0564-53-4660

mail: ishizaki@ims.ac.jp

〈キーワード〉

光合成光捕獲系

凝縮相化学量子力学理論

エネルギー移動・電荷移動反応

分子世界の自律性

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

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

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

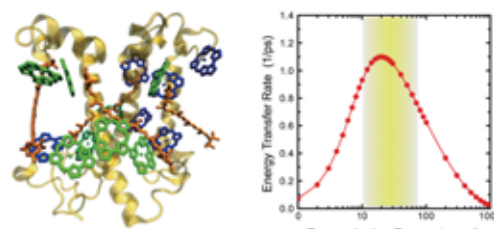
して電子励起が迷子になるようなエネルギーの深い溝にトラップされるのを巧みに避けていること、エネルギー移動の速度が最適化されていることを議論してきました。これら一連の成果は光合成研究に携わる物理化学コミュニティだけでなく量子物理学の分野の研究者をも刺激しており思いがけない連携・進展が見られます。

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

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

### 参考文献

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



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



## ■計算分子科学研究部門

### 高精度な電子状態理論を核とした新しい理論化学の開拓

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

#### (1)高精度電子状態理論の開発

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

#### (2)理論精密分光

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

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

#### (3)光物性科学

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

#### (4)表面触媒・表面光化学

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



### 江原 正博(教授)

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

TEL: 0564-55-7461

FAX: 0564-55-7025

mail: ehara@ims.ac.jp

#### 参考文献

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

<キーワード>

励起状態理論



理論分光



光物性化学



表面反応

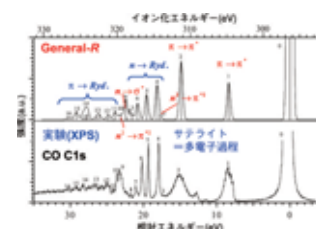


図1: COのC1s内殻イオン化サテライトスペクトル

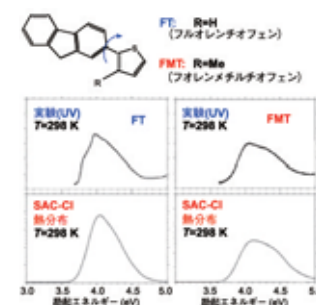


図2: フルオレンチオフェンと置換体の構造と励起スペクトル

■計算分子科学研究部門

生体分子動力学シミュレーション:タンパク質の折りたたみ、変性、凝集、アミロイド線維

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。そのうちの1つであるレプリカ交換法では系のコピー(レプリカ)を複数用意し、シミュレーションの途中で2つのレプリカ間で温度を交換し、各レプリカの温度を上下させることで効率的な構造空間のサンプリングを実現します。最近、我々はより強力なレプリカ置換法を考案しました。この方法を使ってCペプチドが $\alpha$ ヘリックス構造を形成し折りたたむ過程を図1のように明らかにしました。

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って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って折りたたまれ、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。そのしくみを解明するためのレプリカ置換分子動力学シミュレーションも行っています。またアミロイド線維は超音波を使って破壊することができます。その破壊メカニズムを調べるため、我々はアミロイド線維に超音波をかけた非平衡分子動力学シミュレーションを行い、図2のようにキャビテーションによるアミロイド線維の破壊過程を原子レベルで初めて解明しました。

参考文献

- 1) H. Okumura and S. G. Itoh, "Amyloid fibril disruption by ultrasonic cavitation: Nonequilibrium molecular dynamics simulations," *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 10549-10552 (2014).
- 2) S. G. Itoh and H. Okumura, "Replica-permutation method with the Suwa-Todo algorithm beyond the replica-exchange method", *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 570-581 (2013).

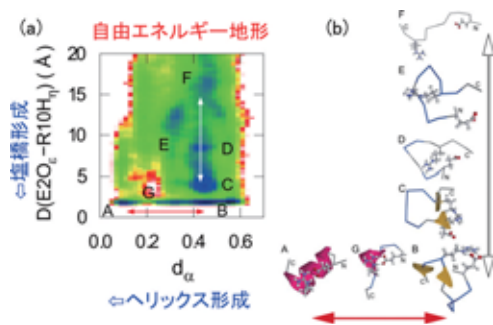


図1: Cペプチドの(a)自由エネルギー地形と(b)各自由エネルギー極小状態における典型的な構造。自由エネルギー地形の横軸は理想的な $\alpha$ ヘリックス構造からどれくらい離れているかを表し、縦軸は塩橋を作るGlu2の酸素原子とArg10の水素原子の距離です。

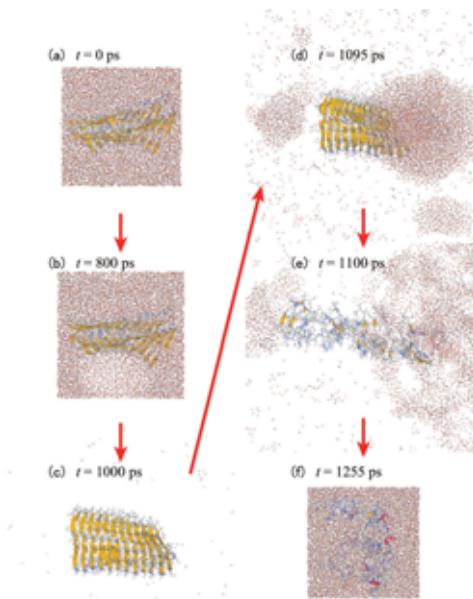


図2: 超音波によるアミロイド線維の破壊過程。気泡がつぶれるときにアミロイド線維が破壊されています。



奥村 久士(准教授)

1998年慶應義塾大学工学部卒業、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



## ■理論・計算分子科学研究部門

### 分子集合体の光電子物性とダイナミクス



藤田 貴敏(特任准教授)

2006年神戸大学発達科学部卒業、2011年同大学大学院人間発達環境学研究所博士課程修了、博士(理学)。日本学術振興会特別研究員、ハーバード大学博士研究員、京都大学博士研究員を経て、2016年4月より現職。

TEL: 0564-55-7260

FAX: 0564-53-4660

mail: tfujita@ims.ac.jp

<キーワード>

励起子

エネルギー移動・電荷移動

電子状態理論

量子ダイナミクス

有機半導体

近年のエネルギー問題から、太陽光エネルギーをいかに効率よく収集・利用するかは非常に重要な問題です。電気を流す有機分子-有機半導体の発見以来、様々な分子を使って光エネルギーを収集・制御する試みが行われてきました。代表的なものが有機薄膜太陽電池で、シリコン太陽電池と比べてフレキシブル・低コストといった利点があります。他方、超分子化学の発展や自己組織化の利用により、分子からボトムアップでナノ構造体を作る研究も盛んに行われています。具体的には構造制御を利用した物性・機能のコントロールや、独特な物性を持つソフトマターのデザインが進められています。

分子結晶や様々なソフトマター、それらは構造乱れやゆらぎの大小といった差違はあるものの、いずれも構成要素が分子間相互作用によって多数集積した系です。分子が集積した系の物性は孤立分子のそれと比べてどう違っているでしょうか？

凝集した多数の分子は分子間相互作用のため協同的に振る舞うことができ、光吸収に伴って集団的な電子励起状態を形成できるようになります。電子励起状態のある種の準粒子-電子と正孔が対になった励起子と考えると、相互作用によって励起子波動関数が分子間に非局在化するともいえます。分子集合体の光物性の特徴としては、J会合体で見られるような吸収スペクトルのレッドシフトや、ある分子から別の分子へ電子励起状態が移動する蛍光共鳴エネルギー移動などがあります。また、分子間距離が近くなって各分子の分子軌道が重なる場合には、電子や正孔が分子間を移動する電荷移動や、励起子が電子と正孔に分かれる電荷分離が起きることもあります。このような分子集積の結果として

#### 参考文献

- 1) T. Fujita, J. Huh, S. K. Saikin, J. C. Brookes, A. Aspuru-Guzik, "Theoretical characterization of excitation energy transfer in chlorosome light-harvesting antennae from green sulfur bacteria," *Photosynth. Res.* **120**, 273-289 (2014).
- 2) T. Fujita, S. Atahan-Evrenk, N. P. D. Sawaya, A. Aspuru-Guzik, "Coherent Dynamics of Mixed Frenkel and Charge Transfer Excitons in Dinaphtho[2,3-b:2'3'-f]thieno[3,2-b]-thiophene Thin Films: The Importance of Hole Delocalization," *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 1374-1380 (2016).

現れる光電子物性が我々の研究ターゲットです。

当研究室では、分子結晶からソフトマターを含めた様々な分子集合体を研究の対象にして理論的・計算科学的研究を行っています。具体的には分子が多数集積した系の光電子物性やエネルギー移動・電荷移動のダイナミクス、さらにはエネルギー変換機構や秩序-物性相関を理解することを目標にしています。

そのためには分子系で励起子や電荷がいかに振る舞うかを知る必要があります。しかしながら、分子が多数会合した凝集系の電子状態やそのダイナミクスを取り扱うことは最新の計算科学でも非常に困難です。分子間相互作用により波動関数が非局在化する効果と、分子振動により波動関数が変調を受ける効果とのバランスによって、励起子や電荷の性質が決まるため、これら二つの効果を同時に考慮する必要があります。我々は電子状態理論・分子動力学法・量子ダイナミクス法などの様々な計算法を駆使することにより、凝集系の量子輸送や物性計算を行える手法を開発してきました。

これまでに行った主な研究テーマは光合成アンテナ系クロロソーム内の電子励起エネルギー移動(図1)や、p型有機半導体薄膜の励起子ダイナミクス(図2)があります。今後はより複雑な構造・組成を持つ系の物性やダイナミクスへと展開していく予定です。実験グループとの連携も視野にいれており、理論・実験の両面からの共同研究や、合理的物質設計に向けた基盤研究を行っていききたいと思います。

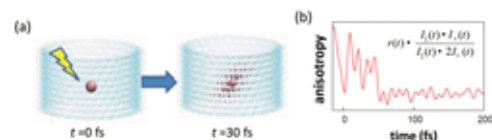


図1:(a)光合成アンテナ系クロロソーム内の励起エネルギー移動の可視化 (b) 蛍光異方性のダイナミクス

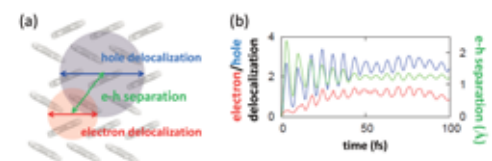


図2:(a)p型有機半導体ジナフトチエノチオフェン薄膜の電子-正孔ダイナミクスの模式図 (b) 電子の非局在化(electron delocalization, 赤)、正孔の非局在化(hole delocalization, 青)、電子-正孔距離(e-h separation, 緑)

## ■理論・計算分子科学研究部門

### 生体分子マシンの機能ダイナミクスを理論的手法で解明し、デザインする



岡崎 圭一(特任准教授)

2004年京都大学理学部卒、  
2009年神戸大学大学院自然科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(DC2, PD)、同海外特別  
研究員、米国立衛生研究所  
博士研究員、マックスプランク  
生物物理学研究所博士研究員  
を経て、2016年6月より現職。

<キーワード>

理論生物物理

分子モーター

トランスポーター

バイオエナジェティクス

分子シミュレーション

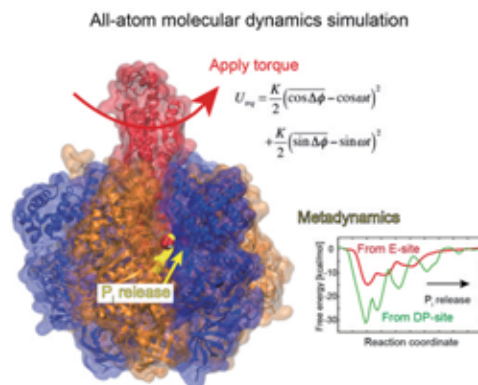
機能ダイナミクスは、生体分子マシンが働く仕組みを理解する上で必要不可欠です。例えば、モータータンパク質は、ATP加水分解エネルギーを用いて、レールの上を歩いたり、固定子に対して回転したりします。膜輸送タンパク質は、内側に開いた構造と外側に開いた構造との間で構造変化することで、基質分子を輸送しています。このように自然が作り上げた精巧かつダイナミックなナノマシンの働く仕組みを原子・分子レベルで解明し、そのデザイン原理を学ぶことが目標です。

生体分子マシンの機能ダイナミクスは、幅広い階層の動き・反応が複雑にからみあっています。このようなダイナミクスを理解するには、多階層な(マルチスケールな)モデルを駆使する必要があります。従来の全原子分子動力学シミュレーションのみでは、とても太刀打ちできません。なぜなら、生体分子マシンは巨大複合体で、溶媒分子も含めると全原子数は数十万以上になる上に、典型的な機能時間スケールはミリ秒以上であるからです。私たちは、全原子モデルや粗視化モデルを用いた分子シミュレーションや、統計力学に基づいた速度論モデルなどを駆使してこの問題に取り組んでいます。

私たちはこれまで、マルチスケールなモデルを駆使して、細胞内の主なエネルギー供給源である

ATP合成酵素に取り組んできました。<sup>1-3)</sup> その酵素部分であるF<sub>1</sub>-ATPaseは、ATP加水分解エネルギーを使って中心軸を回転させる回転分子モーターです。その化学力学共役メカニズムの中で、回転力を生み出す重要なステップである、ATP加水分解後のリン酸解離のタイミングについて、一分子実験で議論が分かれていました。そこで私たちは、全原子分子動力学シミュレーションに基づいてリン酸解離の時定数を見積もり実験値と比較することで、リン酸解離のタイミングと経路を明らかにして、議論に決着を付けました。<sup>1)</sup> また、共通の回転軸を介してF<sub>1</sub>とF<sub>0</sub>の2つのモーターが協同して働く仕組みを、ねじれ弾性や摩擦といった力学的特性に基づいたマスター方程式を用いて明らかにしました。<sup>2)</sup> このように、生体分子マシンは、様々な階層で面白い問題が満載です。

機能ダイナミクスをシミュレーションによって直接原子・分子レベルで“見る”ことで、その仕組みを理解していきたいと思っています。そのために、状態間遷移ダイナミクスを効率的にシミュレーションする手法を開発します。そして、そこから得られた知見を生かして、より効率のいい/より速い/より制御可能な生体分子マシンを創ることを実験家と共同で目指します。



F<sub>1</sub>-ATPaseの全原子分子動力学シミュレーションにおいて、回転軸γサブユニットに回転力をかけたり、リン酸にバイアスポテンシャルをかけたりして機能ダイナミクスを促進することで、自由エネルギーなどを見積もった

#### 参考文献

- 1) K. Okazaki & G. Hummer, "Phosphate release coupled to rotary motion of F<sub>1</sub>-ATPase." *Proc. Natl. Acad. Sci. U S A* **110**:16468-16473 (2013).
- 2) K. Okazaki & G. Hummer, "Elasticity, friction, and pathway of gamma-subunit rotation in F<sub>0</sub>F<sub>1</sub>-ATP synthase." *Proc. Natl. Acad. Sci. U S A* **112**:10720-10725 (2015).
- 3) 岡崎圭一 "F<sub>1</sub>-ATPaseの機能的運動のマルチスケールな解析: リン酸解離からγサブユニット回転の弾性・摩擦まで." *生物物理* **55**:208-209 (2015).



■ 光分子科学第二研究部門  
アト秒量子エンジニアリング



大森 賢治(教授)

1987年東京大学卒業、1992年同大学院工学系研究科博士課程修了、工学博士。東北大学助手・助教授を経て2003年9月より現職。2001年～2016年JST CREST事業併任、2004年～2005年東北大学客員教授、2007年～2008年東京工業大学客員教授、2009年～2011年東京大学客員教授、2012年～ハイデルベルグ大学客員教授、2014年～ストラズブル大学客員教授。2007年日本学士院学術奨励賞、2009年アメリカ物理学会フェロー表彰、2012年ドイツフンボルト賞。  
TEL: 0564-55-7361  
FAX: 0564-54-2254  
mail: ohmori@ims.ac.jp

<キーワード>

アト秒

コヒーレント制御

量子力学

波束

分子コンピューター

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

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

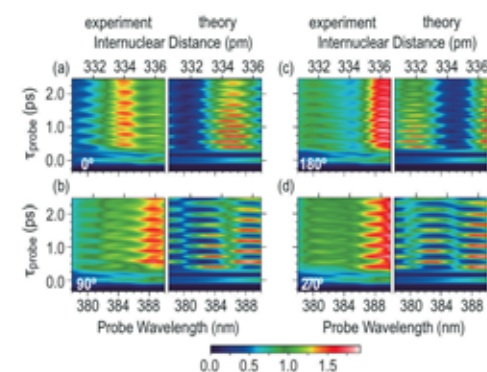
参考文献

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

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

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

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



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

## ■光分子科学第三研究部門

### 放射光を利用した分子科学:分子間相互作用系の局所解析



#### 小杉 信博(教授)

1976年京都大学卒、1981年  
東京大学大学院理学系研究  
科修士、理学博士。日本学術  
振興会奨励研究員、東京大学  
理学部助手・講師、京都大学  
助教授を経て1993年1月より  
現職。1994年～2010年、2014

年～UVSOR施設長併任。  
1996年カナダ・マックマスター  
大学、2008年フランス・P&M  
キュリー(パリVI)大学、2011年  
フランス・パリ南(パリXI)大学、  
2013年ドイツ・ベルリン自由  
大学・客員教授。

TEL: 0564-55-7390

FAX: 0564-55-7390

mail: kosugi@ims.ac.jp

〈キーワード〉

X線分光

●  
内殻励起

●  
局所電子構造解析

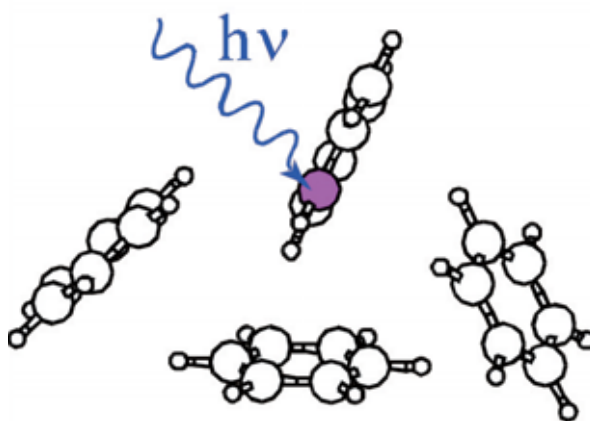
●  
分子間相互作用

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

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

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

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



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

■ 光分子科学第三研究部門  
機能性大型分子材料の光・電子物性評価



解良 聡(教授)

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

<キーワード>

有機半導体物性

● 波動関数分布

● 弱い相互作用

● 自己組織化

● 電子分光

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

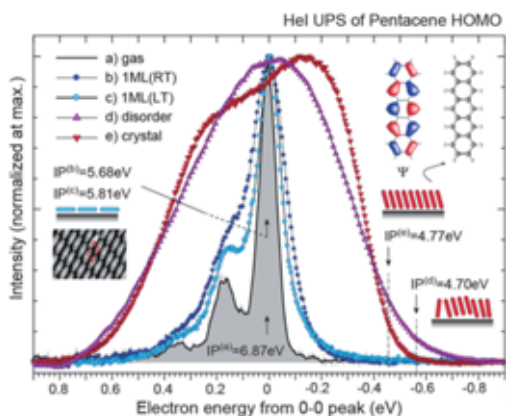
光電子分光法による電子状態評価は「分子の中の電子の姿」を量子論的に明らかにする上で極めて有効ですが、分子材料に対する実験的な難しさ(試料作製、光損傷や帯電回避など測定技術)などから、電気伝導特性の中身とリンクさせることが容易ではありませんでした。最近になってようやく技術が浸透し、高感度紫外光電子分光の実現による研究成果

参考文献

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

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

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

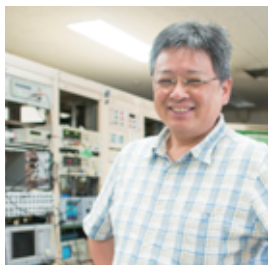


ペンタセン分子の集合状態に依存した最高占有単位HOMOの状態変化



## ■光源加速器開発研究部門

### 相対論的電子ビームを用いた光発生



加藤 政博(教授)

1981年東北大学理学部卒、  
1986年東京大学大学院理  
学系研究科中退、理学博士。  
高エネルギー加速器研究機  
構物質構造科学研究所助手  
を経て2000年3月分子科学  
研究所助教授着任、2004年  
1月より現職。

TEL: 0564-55-7206

FAX: 0564-54-7079

mail: mkatoh@ims.ac.jp

〈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

分子科学研究所の保有する電子加速器UVSORはおよそ30年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では安定性や強度に優れた共振器型自由電子レーザーの開発を進めてきました。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も行っています。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。最近では、光渦と呼ばれる螺旋状の波面を持つ奇妙な光が発生できることもわかってきました。その放射原理を解明することで、光渦が自然界に広く存在する可能性を世界に先駆けて示しました。

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、実用化を意識しながら、研究を進めていきたいと考えています。また、超高性能電子加速器を用いた次世代シンクロトロン光源の検討にも着手しています。



UVSOR-III電子蓄積リング

## ■ 光物性測定器開発研究部門

### 電子構造の直接観測による固体物性の発現機構の解明



田中 清尚(准教授)

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

TEL: 0564-55-7202

mail: k-tanaka@ims.ac.jp

〈キーワード〉

強相関電子系

●  
シンクロトロン光

●  
電子構造

●  
光電子分光

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

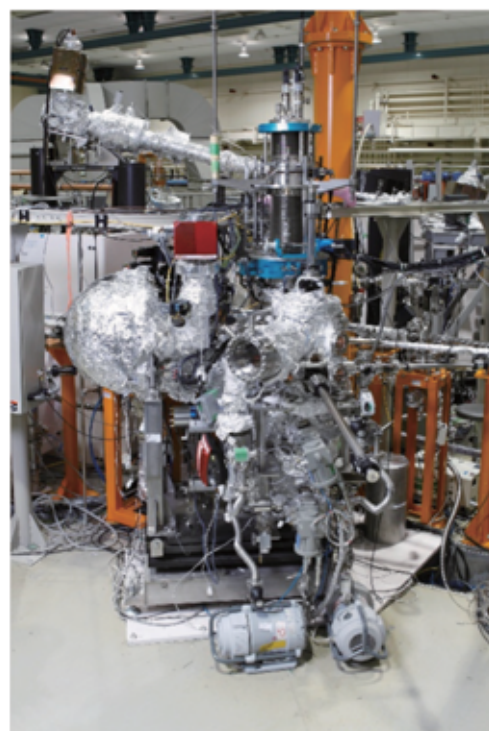
これらの物性は、物質のフェルミ準位のごく近傍の電子状態が担っていて、その電子状態を観測することは物性発現機構の理解、そして新物性の発見に

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

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

#### 参考文献

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



UVSOR-II BL7Uの  
真空紫外3次元角度分解光電子分光ビームライン

## ■光化学測定器開発研究部門

### 分子の内殻正孔状態と緩和ダイナミクス



繁政 英治(准教授)

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

TEL: 0564-55-7400

FAX: 0564-55-7400

mail: sigemasa@ims.ac.jp

〈キーワード〉

シンクロトロン光

●  
内殻電子

●  
電子相関

●  
短波長レーザー

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

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

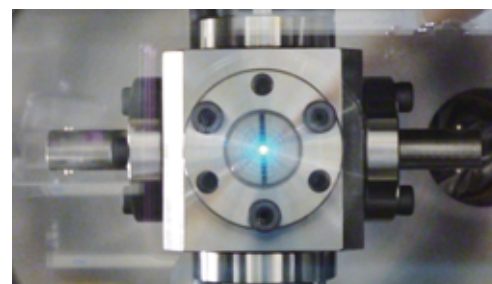
偏光ベクトルに対する電子やイオン放出方向の測定や、さらに高度な電子とイオンのベクトル相関の測定が必要になります。我々のグループでは、このような実験研究を、海外の研究者も含めた共同研究として推進しています。特に、軟X線領域の分子科学の興味深い研究対象の一つとして、多電子励起状態の生成と崩壊過程に注目した研究を行っています。多電子励起過程は、分子場中を運動する電子間の相関に基づいて起こると考えられます。つまり、多電子励起状態の理解は我々が“分子”というものを正しく描写するために必要な根本的な情報の一つとして重要なのです。我々は、極端紫外光研究施設(UVSOR)に建設した専用ビームラインを利用して、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

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

#### 参考文献

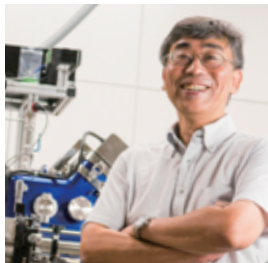
- 1) K. Tamasaku, E. Shigemasa, Y. Inubushi, T. Katayama, K. Sawada, H. Yumoto, H. Ohashi, H. Mimura, M. Yabashi, K. Yamauchi, and T. Ishikawa, "X-ray two-photon absorption competing against single and sequential multiphoton processes", *Nature Photon.* **8**, 313-316 (2014).
- 2) K. Tamasaku, M. Nagasono, H. Iwayama, E. Shigemasa, Y. Inubushi, T. Tanaka, K. Tono, T. Togashi, T. Sato, T. Katayama, T. Kameshima, T. Hatsui, M. Yabashi, and T. Ishikawa, "X-ray two-photon absorption competing against single and sequential multiphoton processes", *Phys. Rev. Lett.* **111**, 043001 (5 pages) (2013).
- 3) H. Iwayama, M. Nagasono, J.R. Harries, and E. Shigemasa, "Demonstration of up-conversion fluorescence from Ar clusters in intense free-electron-laser fields", *Opt. Express* **20**, 23174-23179 (2012).

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



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





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～2013年3月分子  
スケールナノサイエンスセン  
ター長、2011年4月～現在  
物質分子科学研究領域主幹、  
2014年9月～2016年3月機器  
センター長併任。

TEL: 0564-55-7345

FAX: 0564-55-7448

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

物質分子科学のための新しい分光法の開発

現代の物質科学は高性能だけでなく安全安心などさまざまな観点から調和のとれた物質材料の創製を求められており、物質材料・素子の特性を詳細に評価・解析し、よりよい物質材料設計を行う必要があります。そのため、物質材料を解析する手法の空間分解能や時間分解能がますます求められています。我々は、主にシンクロトロン放射光を用いた分光学的手法に基づいた新しい測定手法の開発とその応用に取り組んでいます。

現在取り組んでいる一つの課題は、雰囲気制御硬X線光電子分光装置の開発と、これを用いた燃料電池の動作下での状態解析により性能の失活機構や被毒の原因究明です。光電子分光法は、通常は高真空下での測定が必須ですが、我々はエネルギーの大きい硬X線を用いることで、1.0気圧までの測定が可能な光電子分光装置の開発に成功し、固体高分子形燃料電池動作下での正極Pt電極の光電子スペク

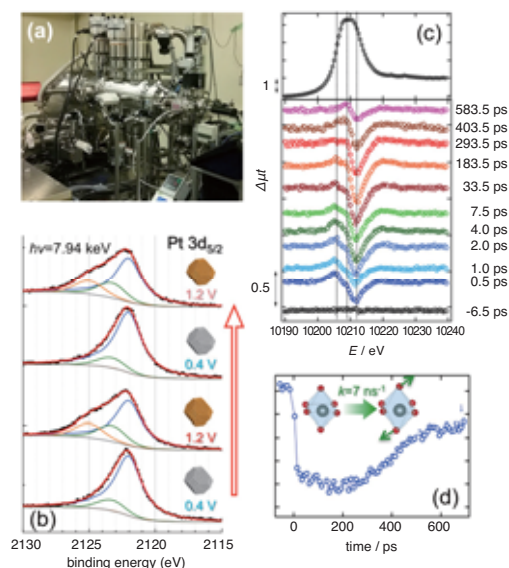
参考文献

- 1) "In situ study of oxidation states of platinum nanoparticles on a polymer electrolyte fuel cell electrode by near ambient pressure hard X-ray photoelectron spectroscopy" Y. Takagi, H. Wang, Y. Uemura, T. Nakamura, L. -W. Yu, O. Sekizawa, T. Uruga, M. Tada, G. Samjeské, Y. Iwasawa and T. Yokoyama, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 6013 (2017).
- 2) "Dynamics of Photoelectrons and Structural Changes of Tungsten Trioxide Observed by Femtosecond Transient XAFS" Y. Uemura, D. Kido, Y. Wakisaka, H. Uehara, T. Ohba, Y. Niwa, S. Nozawa, T. Sato, K. Ichiyangagi, R. Fukaya, S. Adachi, T. Katayama, T. Togashi, S. Owada, K. Ogawa, M. Yabashi, K. Hatada, S. Takakusagi, T. Yokoyama, B. Ohtani, and K. Asakura, *Angew. Chem. Int. Ed.* **55**, 1364 (2016).
- 3) "In situ investigation of an oxidation reaction on a Pt/C electrode using ambient pressure hard X-ray photoelectron spectroscopy" Y. Takagi, H. Wang, Y. Uemura, E. Ikenaga, O. Sekizawa, T. Uruga, H. Ohashi, Y. Senba, H. Yumoto, H. Yamazaki, S. Goto, M. Tada, Y. Iwasawa and T. Yokoyama, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 131602 (2014).
- 4) "Anisotropic Thermal Expansion and Cooperative Invar/Anti-Invar Effects in Mn Alloys" T. Yokoyama and K. Eguchi, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 075901 (2013).
- 5) "Anharmonicity and Quantum Effects in Thermal Expansion of an Invar Alloy" T. Yokoyama and K. Eguchi, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 065901 (2011).

トルを通してPtの化学状態変化の追跡に成功しました。また、瞬時の電圧変化に対する応答を観測するため、0.3秒の時間分解能で光電子スペクトルを測定できるようなシステムを構築しました。さらには、光電子分光が検出電極を物理的に挿入することなく各構成物質の電位を観測できる特徴を有することを活かして電極界面の電子状態解析にも取り組んでいます。

また、人工光合成を目的として開発が進められている光触媒の光吸収後の電子励起状態の構造を解析するため、シンクロトロン放射光やX線自由電子レーザーを用いて、高速時間分解(100億～10兆分の1秒)X線吸収分光法により行っています。これにより、有望な光触媒である酸化タングステン(VI)やBiVO<sub>4</sub>において、移動可能な電荷が生成している状態での詳細な構造解析に成功しました。

- 6) "Magnetic circular dichroism near the Fermi level" T. Nakagawa and T. Yokoyama, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 237402 (2006).



(a)Spring-8 BL36XUに設置された雰囲気制御(最高圧力1.0気圧)型硬X線光電子分光装置。(b)固体高分子形燃料電池正極Pt/C電極での正負極間電圧変化におけるPt 3d<sub>5/2</sub>光電子スペクトルの応答(室温,飽和水蒸気圧下)。(c)酸化タングステン(VI)光触媒の光励起後のW-L<sub>m</sub>吸収スペクトルの時間変化。(d)酸化タングステン(VI)のW-L<sub>m</sub>吸収時間応答と電荷分離状態の構造変化。

## ■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年京大大学院理学部卒、  
1992年同大学院理学研究科  
博士課程修了、理学博士。学習  
院大学院理学部助手を経て  
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変えたり、あるいは物理圧力をわずかに加えるだけで、金属、絶縁体、強誘電、反強磁性、超伝導といった種々の物性を示します。

### 参考文献

- 1) S. Jin, X. Ding, X. Feng, M. Supur, K. Furukawa, S. Takahashi, M. Addicoat, M. E. El-Khouly, T. Nakamura, S. Irle, S. Fukuzumi, A. Nagai, and D. Jiang, "Charge Dynamics in A Donor-Acceptor Covalent Organic Framework with Periodically Ordered Bicontinuous Heterojunctions," *Angew. Chem., Int. Ed.* **52**, 2017-2021 (2013).
- 2) T. Naito, T. Karasudani, K. Ohara, T. Takano, Y. Takahashi, T. Inabe, K. Furukawa, and T. Nakamura, "Simultaneous Control of Carriers and Localized Spins with Light in Organic Materials," *Adv. Mater.* **24**, 6153-6157 (2012).
- 3) K. Furukawa, T. Hara and T. Nakamura, "Spin-Dynamics in Vicinity of Spin-Gap Phase Transition for Organic Conductor (TMTTF)<sub>2</sub>X," *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 043702 (4 pages)(2010).
- 4) F. Iwase, K. Sugiura, K. Furukawa and T. Nakamura, "<sup>13</sup>C NMR study of the magnetic properties of the quasi-one-dimensional conductor (TMTTF)<sub>2</sub>SbF<sub>6</sub>," *Phys. Rev. B* **84**, 115140 (7 pages)(2011).
- 5) F. Iwase, K. Sugiura, K. Furukawa and T. Nakamura, "The ground states and critical behavior in the quasi-one-dimensional

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

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

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

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、最近は先端電子スピン共鳴装置による生体関連試料の構造計測も行っています。

complexes (TMTTF)<sub>2</sub>[(AsF<sub>6</sub>)<sub>x</sub>(SbF<sub>6</sub>)<sub>1-x</sub>]," *Phys. Rev. B* **81**, 245126 (6pages) (2010) .

6) K. Furukawa, K. Sugiura, F. Iwase and T. Nakamura, "Structural Investigation of the Spin-singlet Phase in (TMTTF)<sub>2</sub>I," *Phys. Rev. B* **83**, 184419 (5 pages)(2011) .



多周波パルス時間分解ESR分光器

## ■分子機能研究部門 有機薄膜太陽電池

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って起こっています。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、軽量な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、バルクヘテロ接合同もよばれる)(図1)のコンセプト<sup>1,2)</sup>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使っています。また、1990年に、有機タンデム接合を世界で初めて提案し<sup>3)</sup>、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", in *Proc. SPIE*, Vol. **7052**, Organic Photovoltaics IX, 70520H-1-6 (2008).
- 5) M. Kubo, T. Kaji, K. Iketaki, M. Hiramoto, "Conduction Type Control of Fullerene Films From n- to p-Type by Molybdenum Oxide Doping", *Appl. Phys. Lett.* **98**, 073311 (2011).

有機薄膜太陽電池の分野でブレイクスルーを起こすには、有機半導体の物性物理学、すなわち、イレブンナイン超高純度化、ドーピングによるpn制御、内蔵電界形成、オーミック接合形成、半導体パラメータ精密評価、等を、シリコン無機半導体のレベルまで引き上げる必要があります。また、有機混合接合層のナノ構造設計・製作技術の開発も不可欠です。これらの有機半導体基礎研究とデバイス応用をリンクさせ、数年以内に実用化に十分な、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、フラレン(C<sub>60</sub>)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。<sup>4)</sup>

また、セブンナインC<sub>60</sub>にモリブデン酸化物(MoO<sub>3</sub>)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C<sub>60</sub>のp型化<sup>5)</sup>、pnホモ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。

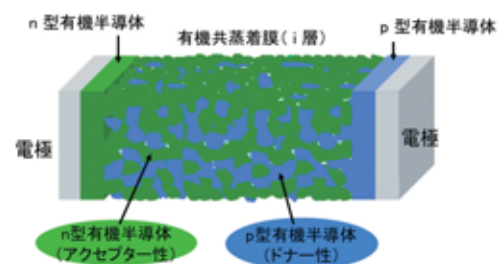


図1: p-i-nバルクヘテロ接合(有機混合接合)の概念



図2: セブンナイン(7N, 99.99999%) C<sub>60</sub>単結晶

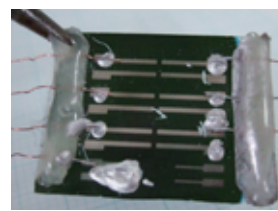
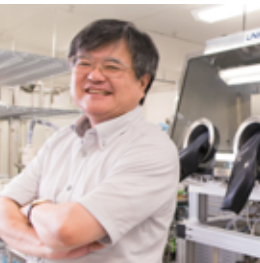


図3: 5.3%最高効率p-i-nセルの写真



### 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

<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



## ■分子機能研究部門

### 固体核磁気共鳴法による生体分子・分子材料の解析



#### 西村 勝之(准教授)

1993年兵庫県立姫路工業  
大学理学部(現・兵庫県立大学)

卒業、1999年同大学大学院  
理学研究科博士課程終了・理学  
博士。米国立高磁場研究所、  
フロリダ州立大学博士研究員、  
横浜国立大学工学研究院助手  
を経て、2006年4月より現職。

TEL: 0564-55-7415

FAX: 0564-55-7415

mail: nishimur@ims.ac.jp

〈キーワード〉

固体NMR

膜タンパク質

脂質

測定法開発

ハードウェア開発

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

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

#### 参考文献

- 1) K. Nishimura, S. Kim, L. Zhang, T. A. Cross, *Biochemistry*, **41**, 13170-13177 (2002).
- 2) J. Hu, R. Fu, K. Nishimura, L. Zhang, H.X Zhou, D. D. Busath, V. Vijayvergiya, T. A. Cross, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **103**, 6865-6870 (2006).
- 3) N. Uekama, T. Aoki, T. Maruoka, S. Kurisu, A. Hatakeyama, S. Yamaguchi, M. Okada, H. Yagisawa, K. Nishimura\*, S. Tuzi\*, *Biochim. Biophys. Acta* **1788**, 2575-2583 (2009).
- 4) M. Tanio, K. Nishimura\*, *Biochim. Biophys. Acta* **1834**, 1034-1043 (2013).
- 5) M. Yagi-Utsumi, K. Kato, and K. Nishimura\*, *PlosONE* **11**, 0146405 (1-10)(2016).
- 6) K. Nishimura\*, A. Naito. "REDOR in Multiple Spin System", *Modern Magnetic Resonance*, Springer, The Netherlands (2006).
- 7) K. Nishimura\*, A. Naito, *Chem. Phys. Lett.* **380**, 569-576 (2003).
- 8) K. Nishimura\*, A. Naito, *Chem. Phys. Lett.* **402**, 245-250 (2005).
- 9) K. Nishimura\*, A. Naito, *Chem. Phys. Lett.* **419**, 120-124 (2006).

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

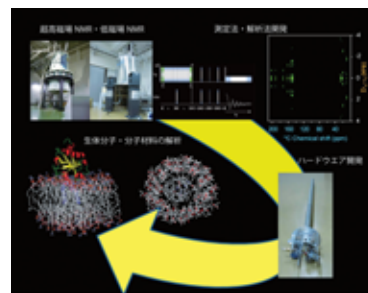
現在は、脂質膜と相互作用して機能を発現する膜表在性タンパク質<sup>3,4)</sup> およびペプチドの解析<sup>5)</sup> それらを対象とした構造解析法、測定法の開発を行っています。

さらに分子材料<sup>10)</sup> 生体高分子材料<sup>11)</sup> 合成高分子<sup>12)</sup> などを対象として、所外の複数の研究機関と共同研究を行っています。今後、生体分子に加え、多様な有機分子を対象とした固体NMR測定法の開発を行っていきたいと思います。

10) T. Iijima, K. Nishimura\*, *Chem. Phys. Lett.* **514**, 181-186 (2011).

11) T. Asakura, T. Ohota, S. Kametani, K. Okushita, K. Yazawa, Y. Nishiyama, K. Nishimura, A. Aoki, F. Suzuki, H. Kaji, A. Ulrich, M. Williamson, *Macromolecules* **48**, 28-36 (2015).

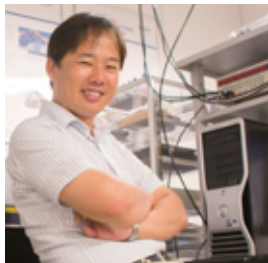
12) N. Ousaka, F. Mamiya, Y. Iwata, K. Nishimura, and E. Yashima, *Angew. Chem. Int. Ed.* **56**, 791-795 (2017)



研究概念図

■ 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



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年～  
2005年学術振興会特別研究  
員、2006年～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

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。

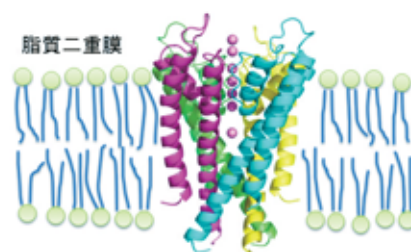
このような膜タンパク質が機能発現する分子メカニズムの解明には、基質や補酵素となるイオンや分子との相互作用に関する原子レベルでの構造情報が必要です。一般的に膜貫通タンパク質の構造解析は難しく、Protein Data Bankへの登録比率は約2%にすぎません。また、得られた構造についても水素原子が見えないため、イオンの配位構造や分子内、分子間水素結合構造などの情報が不足しています。このような機能発現に重要な役割を果たす部分構造を、赤外差スペクトル法を活用することで明らかにし、膜貫通タンパク質の機能発現機構に迫ることを目的に研究を進めています。

参考文献

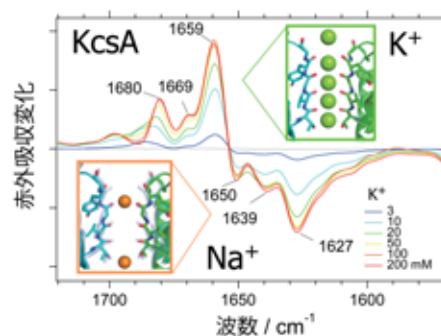
- 1) Y. Furutani, M. Shibata and H. Kandori, "Strongly Hydrogen-Bonded Water Molecules in the Schiff Base Region of Rhodopsins", *Photochem. Photobiol. Sci.* **4**, 661-6 (2005).
- 2) Y. Sudo, Y. Furutani, J. L. Spudich and H. Kandori, "Early Photocycle Structural Changes in a Bacteriorhodopsin Mutant 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, H. Shimizu, Y. Asai, T. Fukuda, S. Oiki and H. Kandori, "ATR-FTIR Spectroscopy Revealed the Different Vibrational Modes of the Selectivity Filter Interacting with K<sup>+</sup> and Na<sup>+</sup> in the Open and Collapsed Conformations of the KcsA Potassium Channel", *J. Phys. Chem. Lett.* **3**, 3806-10 (2012).
- 5) Y. Furutani, T. Murata and H. Kandori, "Sodium or Lithium Ion-Binding-Induced Structural Changes in the K-ring of V-ATPase from *Enterococcus hirae* Revealed by ATR-FTIR Spectroscopy", *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 2860-3 (2011).

イオン結合に伴う  
赤外差スペクトルの計測

赤外差スペクトル法はロドプシンや光合成タンパク質などの光受容タンパク質では盛んに研究が行われ、その分子メカニズムの解明に大いに役立てられています。これまで古細菌型ロドプシンに対する研究を行い、光駆動プロトンポンプに重要な役割を果たす強い水素結合を形成した水分子を見いだしたり、<sup>1)</sup>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。<sup>2)</sup>また、全反射赤外分光法により、光ではなく、イオン結合による赤外差スペクトルを計測し、ロドプシンの塩化物イオン取込み機構を明らかにしました。<sup>3)</sup>この手法は、KcsAなどのイオンチャネル、<sup>4)</sup>V型ATPase<sup>5)</sup>などのトランスポーターにも適用できる手法です。さらに、ストップフロー法を活用することでミリ秒程度の時間分解計測を目指し、X線結晶構造からは見えてこない膜タンパク質のダイナミックな分子実態に迫りたいと考えています。



カリウムチャネル(KcsA)



(上)カリウムチャネルKcsAの結晶構造

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

## ■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



魚住 泰広(教授)

1984年北海道大学薬学部卒、  
1990年薬学博士。日本学術振  
興会特別研究員、北海道大学  
教務職員、同助手、米国コロ  
ンビア大学研究員、京都大学  
講師、名古屋市立大学教授を  
経て2000年より現職。理化学  
研究所研究チームリーダー。

TEL: 0564-59-5571

FAX: 0564-59-5574

mail: uo@ims.ac.jp

〈キーワード〉

遷移金属触媒

疎水性相互作用

触媒の不斉合成

固定化触媒

人類が化学を体系づける遙か太古の昔から生命は精緻な化学分子変換を実現しています。それら生命化学反応は中性、常圧、常温、水中で高い選択性を伴って進行します。我々は理想的な化学反応システムの創出を目指し、生命化学工程を司る酵素の構造的模倣ではなく、化学反応の駆動原理、駆動システムを生命から学びとることを出発点としました。すなわち酵素はしばしば遷移金属活性中心を持ち、タンパクからなる疎水性ポケットの中で化学反応を駆動します。そこで我々は両親媒性高分子や両親媒性分子集合体が水中でこそ創り出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。

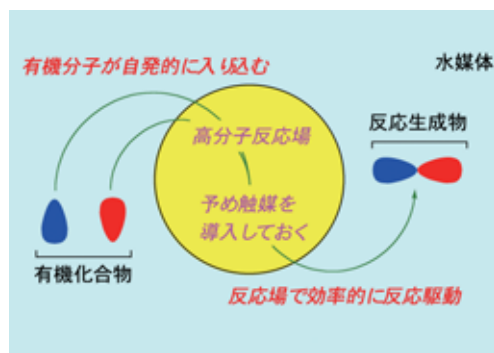
有機分子は元来「油」であり水には馴染みません。水中で高分子触媒を用いて有機化学反応を実施すると、疎水性有機分子は自ずから高分子マトリクス内に入り込んで行き高濃度状態で触媒の近傍に集まり、高効率で触媒反応が駆動されます。すなわち外部からのエネルギーなどに依らず、分子が持つ性質そのものを駆動力とする反応システムです。

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

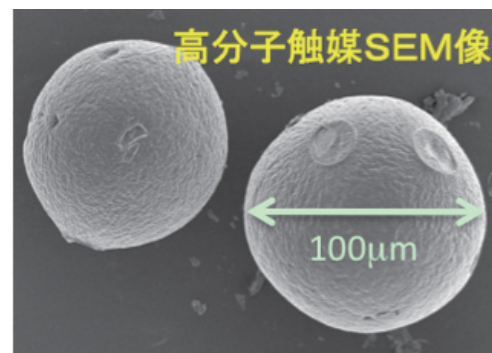
反応系内で自発的に発生させる仕組みの創出など、反応システム全体の設計と構築による21世紀の有機化学反応のパラダイムシフトを目指します。

#### 参考文献

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



疎水性相互作用による反応駆動原理

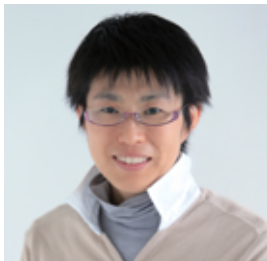


反応駆動の「場」を提供する高分子



## ■錯体触媒研究部門

### キラル分子・キラル機能性物質のデザイン・合成・機能創出



榎山 儀恵(准教授)

2000年名古屋大学工学部卒、  
2005年シカゴ大学大学院化学  
科博士課程修了Ph.D.。米国  
ハーバード大学博士研究員  
(Damon Runyon Cancer  
Research Foundation Post  
Doctoral Research Fellow)、  
東北大学大学院理学研究科  
助手、助教を経て2014年6月  
より現職。

TEL: 0564-59-5531

mail: momiyama@ims.ac.jp

〈キーワード〉

キラリティ

非共有結合相互作用

分子設計

分子認識

分子変換

「キラリティ」は、様々な物質の性質を進展させる要素として知られています。物質にキラリティを組み込むことは、その機能の飛躍的な向上に繋がり、夢の物質を創り出す第一歩となります。私たちのグループでは、キラル機能性物質開発への応用展開を最終目標に、現在、その基盤づくりに取り組んでいます。独自のキラル分子をデザインし、その合成に向けて独自の合成手法を開発し、独自に合成したキラル分子の新たな機能の創出をめざして、日々研究を進めています。

「キラリティ」とは、三次元にある物質がその鏡像と重ね合わせることができない性質のことです。そのような性質をもつ分子を“キラル分子”といいます。建物のどこに「窓」を設置するかが採光や通風に大きな影響を及ぼすように、原子団を三次元空間のどこに配置するかで、その分子さらには物質の性質は大きく変化します。私たちの社会に欠かすことのできない物質・材料にキラリティを組み込むこと、それを可能にする一連の方法論を開発することは、次世代の純粋化学と応用化学の両面、そして材料科学において極めて大きな意味を持ちます。

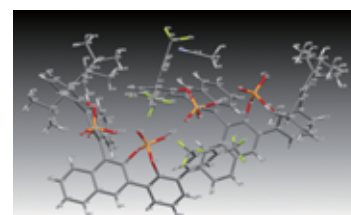
#### 参考文献

- 1) N.Momiyama, H.Tabuse, H.Noda, M.Yamanaka, T.Fujinami, K.Yamanishi, A.Izumiseki, K.Funayama, F.Egawa, S.Okada, H.Adachi, M.Terada, "Molecular Design of a Chiral Brønsted Acid with Two Different Acidic Sites: Regio-, Diastereo-, and Enantioselective Hetero-Diels-Alder Reaction of Azopyridinecarboxylate with Amidodienes Catalyzed by Chiral Carboxylic Acid-Monophosphoric Acid" *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, **138**, 11353-11359.
- 2) N. Momiyama, H. Okamoto, J. Kikuchi, T. Korenaga, M. Terada, "Perfluorinated Aryls in the Design of Chiral Brønsted Acid Catalysts: Catalysis of Enantioselective [4+2] Cycloadditions and Ene- Reactions of Imines with Alkenes by Chiral Mono-Phosphoric Acids with Perfluoroaryls," *ACS Catal.* **6**, 1198-1204 (2016).
- 3) N. Momiyama, K. Funayama, H. Noda, M. Yamanaka, N. Akasaka, S. Ishida, T. Iwamoto, M. Terada, "Hydrogen Bonds-Enabled Design of a  $C_1$ -Symmetric Chiral Brønsted Acid Catalyst," *ACS Catal.* **6**, 949-956 (2016).
- 4) N. Momiyama, T. Narumi, M. Terada, "Design of a Brønsted Acid with Two Different Acidic Sites: Synthesis and Application of Aryl Phosphinic Acid-Phosphoric Acid as a Brønsted Acid Catalyst," *Chem. Commun.* **51**, 16976-16979 (2015).
- 5) N. Momiyama, T. Konno, Y. Furiya, T. Iwamoto, M. Terada, "Design of Chiral Bis-phosphoric Acid Catalyst Derived from

私たちはこれまでに、キラルな小分子を供給する手法のひとつとして、複数の水素結合供与部位を有するキラル分子触媒の開発に成功しました。このキラル分子は、複数あるコンフォメーションのうち、ひとつの特有のコンフォメーションのみをとります。さらに、このキラル分子が、分子性触媒として機能することを見出しました。このキラル分子の振る舞いが、分子内の水素結合や分子修飾に基づく電子のおよび立体的効果によるものであることを実験的に明らかにしています。この結果は、数千から数万の分子量を有するタンパク質の折りたたみ構造や酵素反応と同様の現象が、分子量が数百程度の人工キラル分子により簡易的に実現できることを示唆しています。

私たちは、独自のキラル分子をデザインし、独自の反応・手法の開発により独自のキラル分子の合成を進めています。キラル分子のデザインと合成を通じて、さらに、様々な解析手法を駆使しながら、これまで十分に解明されてこなかった分子の振る舞いを理解し、従来とは異なる分子の性質を見出すことで、新たな機能を有するキラル物質を創り出していきたいと考えています。

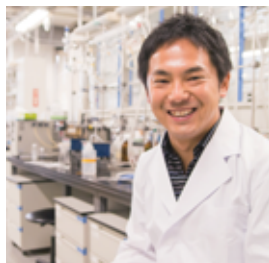
- (*R*)-3,3'-Di(2-hydroxy-3-arylphenyl) binaphthol: Catalytic Enantioselective Diels-Alder Reaction of  $\alpha,\beta$ -Unsaturated Aldehydes with Amidodienes," *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 19294-19297 (2011).
- 6) N. Momiyama, H. Tabuse, M. Terada, "Chiral Phosphoric Acid-Governed Anti-Diastereoselective and Enantioselective Hetero-Diels-Alder Reaction of Glyoxylate," *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 12882-12883 (2009).
- 7) N. Momiyama, M. W. Kanan, D. R. Liu, "Synthesis of Acyclic  $\alpha,\beta$ -Unsaturated Ketones via Pd(II)-Catalyzed Intermolecular Reaction of Alkynamides and Alkenes," *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 2230-2231 (2007).
- 8) N. Momiyama, H. Yamamoto, "Brønsted Acid Catalysis of Achiral Enamine for Regio- and Enantioselective Nitroso Aldol Synthesis," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 1080-1081 (2005).



開発したキラル分子の三次元構造

■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



正岡 重行(准教授)

1999年同志社大学工学部卒、  
2004年京都大学大学院工学  
研究科博士課程修了、工学  
博士。リバプール大学博士  
研究員、九州大学助手/助教  
を経て2011年2月より現職。

2009年10月より、科学技術  
振興機構さきがけ「光エネル  
ギーと物質変換」研究員(併任)。

TEL: 0564-59-5587

FAX: 0564-59-5589

mail: masaoka@ims.ac.jp

<キーワード>

金属錯体

人工光合成

触媒

酸素発生反応

太陽光エネルギーを利用して、水素やアルコール等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(CO<sub>2</sub>)が還元され炭水化物が合成されると同時に、水(H<sub>2</sub>O)を酸化して酸素(O<sub>2</sub>)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、人工光合成技術の実現に必要な、(1)天然の光合成系に匹敵する高い活性を持ち、(2)耐久性が高く、(3)安価な金属元素により構築される、という3つの条件を満たす酸素発生触媒の開発に世界で初めて成功しました。

天然の光合成反応では、植物中に存在する光化学系IIと呼ばれるタンパク質中に存在する酸素発生

錯体(Oxygen Evolving Complex, OEC)が良好な酸素発生触媒として機能することが知られています。しかし、OECは生体中でのみ安定な構造であり、そのまま取り出して用いることは困難です。そこで我々は、OECの構造のどの部分が高い酸素発生能と関連しているかを考察することで、新たな触媒が開発できるのではないかと考えました。このコンセプトを「植物に学ぶ触媒デザイン」と呼んでいます。上記の「植物に学ぶ触媒デザイン」に基づき、我々は、安価な鉄イオンを用いた人工触媒(鉄五核錯体)を開発しました。この鉄五核錯体の酸素発生速度は、既存の鉄錯体触媒と比較して1,000倍以上向上しており、耐久性も十分に高いことが実証されました。また、反応条件が異なるため厳密な比較は難しいですが、植物の光合成における酸素発生反応速度をも上回ることも示されました。

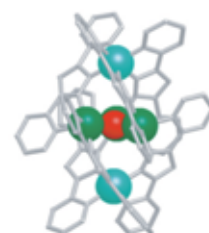
我々の研究グループでは、上記の酸化側の研究に加え、貯蔵可能エネルギーを作り出すための還元側の研究や、光駆動物質変換反応や触媒反応場構築のための基礎研究にも精力的に取り組んでいます。現在も、金属錯体を基盤材料とする人工光合成システムの開発を目指し、日夜研究を続けています。

参考文献

- 1) M. Okamura, M. Kondo, R. Kuga, Y. Kurashige, T. Yanai, S. Hayami, V. K. K. Praneeth, M. Yoshida, K. Yoneda, S. Kawata, S. Masaoka, "A pentanuclear iron catalyst designed for water oxidation," *Nature* **530**, 465 (2016).
- 2) M. Yoshida, M. Kondo, S. Torii, K. Sakai, S. Masaoka, "Oxygen Evolution Catalysed by a Mononuclear Ruthenium Complex bearing Pendant -SO<sub>3</sub>- Groups," *Angew. Chem. Int. Ed.* **54**, 7981 (2015).
- 3) M. Yoshida, M. Kondo, T. Nakamura, K. Sakai, S. Masaoka, "Three Distinct Redox States of an Oxo-Bridged Dinuclear Ruthenium Complex," *Angew. Chem. Int. Ed.* **53**, 11519 (2014).

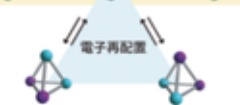
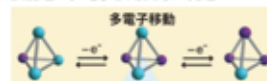
鉄五核錯体触媒の(a)構造ならびに(b)特長

(a) 鉄五核錯体触媒の構造

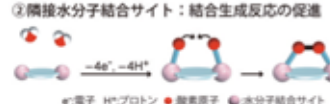


(b) 鉄五核錯体触媒の特長

①多核構造：多電子移動反応の促進

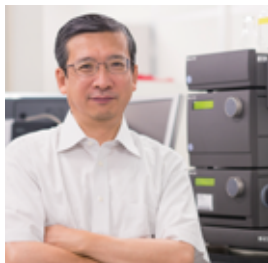


②間接水分子結合サイト：結合生成反応の促進



## ■ 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

〈キーワード〉

金属タンパク質

・  
センサータンパク質

・  
ヘムタンパク質

・  
ヘム

生物は様々な外部環境変化に対応し、生体内の恒常性を維持するための精緻なシステムを有しています。このようなシステムは、外部環境の変化を感知するためのセンシングシステムと、感知した情報に対応して細胞内の恒常性維持に必要な応答反応に関与するレスポンスレギュレーターシステムから構成されています。このようなシステムの中には、遷移金属イオンが関与しているシステムも多く存在しています。代表的な例として、酸素、一酸化炭素、一酸化窒素等の気体分子のような、単純タンパク質では応答不可能なシグナルに対する応答システムがあります。これらのシステムでは、分子中に遷移金属イオンを含む金属タンパク質がセンサー分子として機能することにより、遺伝子発現、走化性制御、セカンドメッセンジャー分子の合成・分解を介した代謝制御などの様々な生理機能制御に関与しています。

また、鉄や銅を始めとする多くの遷移金属イオンは、生体中で金属タンパク質の活性中心として機能

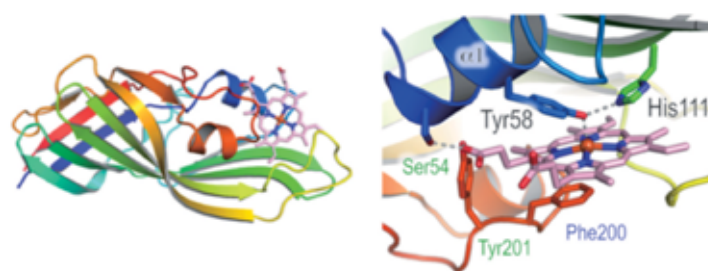
し、生物のエネルギー代謝、物質代謝、シグナル伝達など、様々な生理機能の発現・制御に深く関与しているため、遷移金属イオンそのものの恒常性維持も、生物にとっては必須のものです。生理機能制御に必須な遷移金属イオンの細胞内濃度が低下すれば、生理機能発現に支障をきたす一方で、遷移金属イオンの細胞内濃度が過剰となれば毒性を発揮してしまうため、遷移金属イオンの細胞内濃度を厳密に制御し、その恒常性を維持する仕組みが必要不可欠です。

我々は、構造生物学、遺伝子工学、分子生物学、および各種分光学的な実験手法を駆使することにより、遷移金属イオン、気体分子、光などの外部シグナル感知に関与するセンサータンパク質、および細胞内の遷移金属イオンの恒常性維持に関与するレギュレータータンパク質の構造機能相関の解明を通じて、外部環境に応答した生物の恒常性維持システムの作動原理を明らかにするための研究に取り組んでいます。

#### 参考文献

- 1) "Structural characterization of heme environmental mutants of CgHmuT that shuttles heme molecules to heme transporters," N. Muraki, C. Kitatsugi, M. Ogura, T. Uchida, K. Ishimori, S. Aono, *Int. J. Mol. Sci.* **17**, 829 (10pages) (2016).
- 2) "Structural Basis for Heme Recognition by HmuT Responsible for Heme Transport to the Heme Transporter in *Corynebacterium glutamicum*," N. Muraki, S. Aono, *Chem. Lett.* **45**, 24-26 (2015).
- 3) "A new biological function of heme as a signaling molecule," N. Muraki, C. Kitatsugi, S. Aono, *J. Porphyrins & Phthalocyanines*. **19**, 9-20 (2015).
- 4) "Heme-binding properties of HupD functioning as a

- substrate-binding protein in a heme-uptake ABC-transporter system in *Listeria monocytogenes*," Y. Okamoto, H. Sawai, M. Ogura, T. Uchida, K. Ishimori, T. Hayashi, S. Aono, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **87**, 1140-1146 (2014).
- 5) "Molecular mechanism for heme-mediated inhibition of 5-aminolevulinic acid synthase 1," C. Kitatsugi, M. Ogura, T. Uchida, K. Ishimori, S. Aono, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **87**, 997-1004 (2014).
- 6) "The Dos family of globin-related sensors using PAS domains to accommodate haem acting as the active site for sensing external signals," S. Aono, *Adv. Microbial Physiol.* **63**, 273-327 (2013).

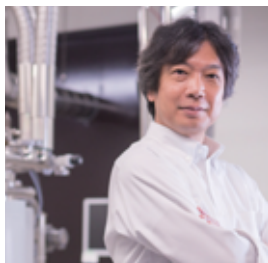


ヘム取り込みタンパク質HtaAのN末ドメインの構造(左)、  
ヘム結合領域の拡大図(右)



## ■生体分子機能研究部門

### 生命分子システムの動的秩序形成と高次機能発現の仕組みの探求



加藤 晃一(教授)

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

TEL: 0564-59-5225

FAX: 0564-59-5225

mail: kkatonmr@ims.ac.jp

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

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

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

#### 参考文献

- 1) H. Yagi, C.-W. Kuo, T. Obayashi, S. Ninagawa, K-H. Khoo, and K. Kato, *Mol. Cell Proteomics* **15**, 3424-3434 (2016). Direct mapping of additional modifications on phosphorylated O-glycans of  $\alpha$ -dystroglycan by mass spectrometry analysis in conjunction with knocking out of causative genes for dystroglycanopathy.
- 2) T. Satoh, T. Toshimori, M. Noda, S. Uchiyama, and K. Kato, *Protein Sci.* **25**, 2095-2101 (2016). Interaction mode between catalytic and regulatory subunits in glucosidase II involved in ER glycoprotein quality control.
- 3) M. Sugiyama, H. Yagi, K. Ishii, L. Porcare, A. Martele, K. Oyama, M. Noda, Y. Yunoki, R. Murakami, R. Inoue, N. Sato, Y. Oba, K. Terauchi, S. Uchiyama, and K. Kato, *Sci. Rep.* **6**, Article number: 35567 (2016). Structural characterization of the circadian clock protein complex composed of KaiB and KaiC by inverse contrast-matching small-angle neutron scattering.

- 4) T. Satoh, T. Toshimori, G. Yan, T. Yamaguchi, and Kato, *Sci. Rep.* **6**, Article number: 20575 (2016). Structural basis for two-step glucose trimming by glucosidase II involved in ER glycoprotein quality control.
- 5) S. Seetaha, M. Yagi-Utsumi, T. Yamaguchi, K. Ishii, S. Hannongbua, K. Choowongkamon, and Kato, *ChemMedChem.* **11**, 363-366 (2016). Application of site-specific spin labeling for NMR detecting inhibitor-induced conformational change of HIV-1 reverse transcriptase.
- 6) M. Yagi-Utsumi, T. Yamaguchi, R. Kitahara and K. Kato, "NMR explorations of biomolecular systems with rapid conformational exchanges," *Molecular Science of Fluctuations Toward Biological Functions (M.Terazima, M.Kataoka, R.Ueoka, and Y.Okamoto ed.)*, Springer (Japan), pp.87-103 (2016).

<キーワード>

生命分子



動的秩序



高次機能



NMR



生命分子のダイナミックな離合集散を通じた超分子装置の形成

## ■生体分子機能研究部門

### 生体分子機械の作動原理の解明、設計、創製



飯野 亮太 (教授)

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

<キーワード>

生体分子機械

生体分子モーター

1分子計測

分子機械設計

生体制御

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

分子機械の代表格は、入力エネルギーを力学的仕事に変換して運動する分子モーターです。私たちは、新しいリニア分子モーター<sup>2)</sup>や回転分子モーター<sup>3,4)</sup>を研究しています。例えば、バイオエタノールの原料となる結晶性多糖を分解するセルラーゼやキチナーゼは、結晶性多糖を固液界面で分解しながら一方向に運動するリニア分子モーターです。駆動力源はATPではなくレールとなる多糖の加水分解エネルギーであり、ミオシン等の従来のリニア

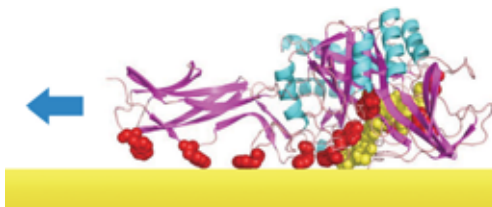
分子モーターとは作動原理が全く異なります。またセルラーゼやキチナーゼは異種分子を同時に作用させると結晶性多糖の分解効率が大きく増加する協調現象、「シナジー効果」が知られています。私たちは、セルラーゼ、キチナーゼの作動原理や協調現象の仕組みを明らかにすべく研究に取り組んでいます。

研究手法には、実際に機能している個々の分子機械を直接観察・操作する1分子計測を駆使します。<sup>5-7)</sup> 光学顕微鏡とマイクロデバイスの融合、超解像蛍光顕微鏡と高速原子間力顕微鏡の複合機<sup>8)</sup>など、新規な1分子計測法の開発を行っています。さらに天然に存在する分子機械を計測するだけでなく、キメラ化、分子進化学、計算科学によるデザイン、非天然アミノ酸導入等の手法を駆使し<sup>9)</sup>新しい機能を持つ分子機械の創製を行います。積極的に創製して作動原理をボトムアップで理解するだけでなく、欲しい機能を持つ分子機械を自在にデザインする「分子機械設計学」の確立を目指します。さらに、創製した分子機械を生き物に戻してやることで細胞や個体の特性(運動性、サイズ等)を制御する「生体制御学」の確立を目指します。

#### 参考文献

- 1) 飯野亮太 “モータータンパク質” 「DOJIN BIOSCIENCE シリーズ: 揺らぎ・ダイナミクスと生体機能—物理化学的視点からみた生体分子—」第15章1節 P233-242. 化学同人 (2013).
- 2) Y. Shibafuji, A. Nakamura, T. Uchihashi, N. Sugimoto, S. Fukuda, H. Watanabe, M. Samejima, T. Ando, H. Noji, A. Koivula, K. Igarashi, R. Iino, “Single-molecule imaging analysis of elementary reaction steps of *Trichoderma reesei* cellobiohydrolase I (Cel7A) hydrolyzing crystalline cellulose Ia and III<sub>1</sub>,” *J. Biol. Chem.* **289**: 14056-14065 (2014).
- 3) H. Ueno, Y. Minagawa, M. Hara, S. Rahman, I. Yamato, E. Muneyuki, H. Noji, T. Murata, R. Iino, “Torque generation of *Enterococcus hirae* V-ATPase.” *J. Biol. Chem.* **289**: 31212-31223 (2014).
- 4) Y. Minagawa, H. Ueno, M. Hara, Y. Ishizuka-Katsura, N. Ohsawa, T. Terada, M. Shirouzu, S. Yokoyama, I. Yamato, E. Muneyuki, H. Noji, T. Murata, R. Iino, “Basic properties of rotary dynamics of the molecular motor *Enterococcus hirae* V<sub>1</sub>-ATPase.” *J. Biol. Chem.* **288**: 32700-32707 (2013).
- 5) S. Enoki, R. Iino, Y. Niitani, Y. Minagawa, M. Tomishige, H. Noji, “High-speed angle-resolved imaging of single gold nanorod with microsecond temporal resolution and one-degree angle precision.” *Anal. Chem.* **87**: 2079-2086 (2015).

- 6) R. Watanabe, K.V. Tabata, R. Iino, H. Ueno, M. Iwamoto, S. Oiki, H. Noji, “Biased Brownian stepping rotation of F<sub>1</sub>F<sub>0</sub>-ATP synthase driven by proton motive force.” *Nature Communications* **4**: 1631 (2013).
- 7) T. Uchihashi, R. Iino, T. Ando, H. Noji, “High-speed atomic force microscopy reveals rotary catalysis of rotorless F<sub>1</sub>-ATPase.” *Science* **333**: 755-758 (2011).
- 8) S. Fukuda, T. Uchihashi, R. Iino, Y. Okazaki, M. Yoshida, K. Igarashi, and T. Ando, “High-speed atomic force microscope combined with single-molecule fluorescence microscope.” *Review of Scientific Instruments* **84**: 073706 (2013).
- 9) A. Yukawa, R. Iino, R. Watanabe, S. Hayashi, H. Noji, “Key chemical factors of arginine finger catalysis of F<sub>1</sub>-ATPase clarified by an unnatural amino acid mutation.” *Biochemistry.* **54**: 472-480 (2015).



新しいリニア分子モーター、キチナーゼ

## ■生体分子機能研究部門 柔らかい分子集合体で創る人工細胞



栗原 顕輔(特任准教授)

2005年東京大学教養学部卒業、2010年同大学大学院総合文化研究科博士課程修了、博士(学術)。東京大学大学院総合文化研究科技術補佐員、東京大学複雑生命システム動態研究教育拠点特任研究員を経て、2014年5月より現職。  
TEL: 0564-59-5579  
mail: kkurihara@ims.ac.jp

〈キーワード〉

両親媒性分子



分子集合体



ベシクル



人工細胞

「生命とは何か?」「生命はどのように誕生したのか?」誰もが一度は抱いたことがある疑問だと思います。生命と非生命を分ける最低限の要素は、自己と環境を分ける境界、生命の個性を記述する情報、内部で行われる代謝反応を促進させる触媒です。私たちのグループでは、分子を有機合成し、分子集合体から生命の最小単位である細胞を構築することを行っています。人工細胞の境界として広く用いられている分子集合体がベシクル(リポソーム)です。ベシクルは、両親媒性分子が疎水性部位を向かい合わせて2分子膜を形成し、それが中空状になった構造をとります。

私たちは以前、菅原正研究室(神奈川大学)のもと、ベシクル内部に鋳型DNA、プライマー、DNA重合酵素などを封入し、ポリメラーゼ連鎖反応させて、ベシクル内部でDNAを増幅させました。この増幅DNAを内包するベシクルに、ベシクル膜分子の原料である膜分子前駆体分子を添加すると、膜内に含まれる酸性触媒分子が膜分子前駆体を加水分解し膜分子が生産されます。ベシクルは生産された膜分子を取り込み肥大し、最終的に分裂しました(ベシクルの生産ダイナミクス)。このベシクル型人工細胞は、内部の情報分子の複製と境界の自己増殖が連動する初めての人工細胞として注目を集めました。

細胞がその個体数を増やし個体を維持していくためには、連動する3要素だけでなく、環境による影響を受けにくい性質(ロバスト性)も備えていることが重要です。本研究室では、以下のように各要素

### 参考文献

1. L. Sheng and K. Kurihara, "Transformation of oil droplets into giant vesicles," *Chem. Commun.* **52**, 7786-7789 (2016).
2. 栗原顕輔 "分子が関わる人工細胞から生命を考える" 季刊生命誌 88 (2016).
3. K. Kurihara, Y. Okura, M. Matsuo, T. Toyota, K. Suzuki and T. Sugawara, "A recursive vesicle-based model protocell with a primitive model cell cycle" *Nature Commun.*, **6**, 8352 (2015).
4. Kurihara K., Tamura M., Shohda K., Toyota T., Suzuki K. & Sugawara T. Self-reproduction of supramolecular giant vesicles combined with the amplification of encapsulated DNA. *Nature Chem.* **3**, 775-781 (2011).

に摂動を与えることで、ベシクル型人工細胞が最適な状態へと自発的に再構築される協奏システムの構築を目指しています。これは、生命がどのように誕生したのかを説明するシステムとして有用です。加えて、周りの環境変化に応じて、最適な状態をベシクル自身が見つけ出すので、ロバスト性をもつ微小反応場としての応用も期待されます。

### (1)境界に摂動を与える場合

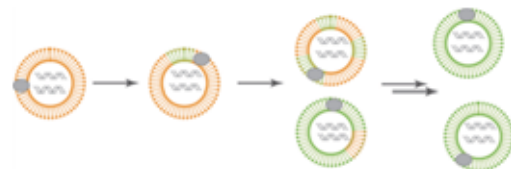
人工細胞系の膜分子、およびその前駆体を複数種用意し、異種の膜分子前駆体を添加し、自己生産ダイナミクスを追跡します。この摂動により、混合脂質系で、よりロバストな自己生産ベシクルの発現が期待されます。このような人工細胞の多様性や集団としての挙動を、フローサイトメトリー計測により分析します。

### (2)情報に摂動を与える場合

情報をもつ高分子の分子量に応じた自己生産過程の変化を捉えます。内包分子の分子量によりベシクルの自己生産速度が異なり、その結果ベシクルどうしの競争が生じます。最も個体数の多いベシクル集団の高分子を調べれば、遺伝子型と表現型の相関をもつ人工細胞が創出できたとと言えるでしょう。

### (3)触媒に摂動を与える場合

触媒分子をベシクル内部で合成することで、ベシクルの自己生産速度に直接作用させることができます。ベシクルの生成速度とベシクル内の触媒分子数がある均衡に収束し、堅牢でしなやかな人工細胞が誕生すると考えられます。

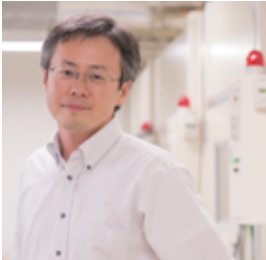


境界に摂動を与えた場合。人工細胞に摂動を与えると異なる種の人工細胞が再構築される。数世代を経るに従い、その環境に適応した人工細胞が増殖していく。触媒および情報は、灰色で示している。



■階層分子システム解析研究部門

生物時計タンパク質が24時間周期のリズムを奏でる仕組みを解き明かす



秋山 修志(教授)

1997年京都大学工学部卒、  
1999年京都大学大学院工学  
研究科修士課程修了、2002年  
京都大学大学院工学研究科  
分子工学専攻博士課程修了、  
博士(工学)。日本学術振興  
会特別研究員、理化学研究所  
基礎科学特別研究員、科学  
技術振興機構さきかき「生命  
現象と計測分析」研究員  
(専任)、名古屋大学大学院  
理学研究科講師/准教授を  
経て2012年4月より現職。  
2013年4月より協奏分子シ  
ステム研究センター長。2008年  
～現在理化学研究所播磨研  
究所客員研究員併任。

TEL/FAX: 0564-55-7363  
mail: akiyamas@ims.ac.jp

(キーワード)

生物時計

生体リズム

時計タンパク質

遅く秩序あるダイナミクス

X線溶液散乱

動的構造解析

「生物(体内)時計」という言葉を皆さんが意識するのはどのようなときでしょうか。渡航や帰国後に頻発する眠気、だるさ、夜間の覚醒…、これら時差ボケの症状は、私たちが生物時計の奏でる24時間周期のリズムのもとで生活していることの証です。生物は非常に巧みな方法で、24時間という地球の自転周期を生体分子の内に取り込んでいます。私たちの研究グループは、24時間周期の根源を分子科学的に解明するという研究テーマに挑戦しています。

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

一方、時を刻む仕組みの分子科学的理解は進んでいません。<sup>1)</sup> Kaiタンパク質時計を例に挙げれば、そのダイナミクスは最長24時間(10<sup>4.94</sup>秒)に及ぶ幅広い時間領域に分布しています。溶液中を漂うKaiタンパク質が相互作用するのはせいぜい10<sup>-2</sup>~10<sup>1</sup>秒のオーダーです<sup>1,2)</sup> 私たちが解明したKaiC

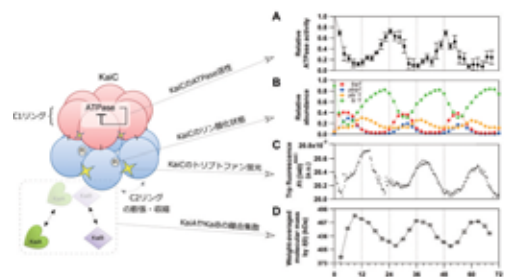
の分子鼓動も24時間を要するほど劇的かつ複雑には見えません。<sup>3)</sup> これまでの概念の積み上げでは、「タンパク質分子」という素材で24時間という遅いダイナミクスが実現されている理由を説明できそうにありません。<sup>1)</sup>

もう一つの謎が周期の温度補償性です。<sup>1)</sup> これは生物時計に普遍的に見いだされる特徴で、時計の発振周期が温度の影響をほとんど受けません。遅い反応は効率の悪い化学反応で説明できるように一見思われます。しかし、そのような反応系は大きな活性化エネルギーを有し、温度の上昇に従って著しく加速されるのが一般的です。生物時計のからくりを迫るためには、「遅いダイナミクス」と「温度補償性」という一見排他的な2つの性質を同時に説明しなければならないのです。

試験管内で再構成できるKaiタンパク質時計は、24時間周期や温度補償性を分子科学的に解明する絶好の研究対象と言えます。私たちの研究グループでは、Kaiタンパク質時計の生化学的な活性測定はもとより、X線結晶構造解析<sup>5)</sup> やX線溶液散乱<sup>2,3,4)</sup> を相補的に利用した動的構造解析、赤外や蛍光等による分子動態計測<sup>3,4)</sup> 計算機を用いた実験データのシミュレーション<sup>6)</sup> などを行うことで、分子時計の実態解明に取り組んでいます。<sup>6)</sup> また、生物時計の研究を支える特殊な実験装置や解析ソフトウェアについても独自開発を進めています。このような研究活動を通して、多くの皆さんに生物、化学、物理、制御工学、計算科学を巻き込んだタンパク質時計研究のフロンティアを体験して頂ければと思います。

参考文献

- 1) S. Akiyama, "Structural and dynamic aspects of protein clocks: How can they be so slow and stable?" *CMLS* **69**, 2147-2160 (2012).
- 2) S. Akiyama et al., "Assembly and Disassembly Dynamics of the Cyanobacterial Periodosome" *Mol. Cell* **29**, 703-716 (2008).
- 3) Y. Murayama et al., "Tracking and Visualizing the Circadian Ticking of the Cyanobacterial Clock Protein KaiC in Solution" *EMBO J.* **30**, 68-78 (2011).
- 4) A. Mukaiyama et al., "A protocol for preparing nucleotide-free KaiC monomer" *BIOPHYSICS* **11**, 79-84 (2015).
- 5) J. Abe et al., "Atomic-scale Origins of Slowness in the Cyanobacterial Circadian Clock" *Science* **349**, 312-316 (2015).
- 6) 秋山 修志, "時間生物学と放射光科学の接点", 放射光 (2016).



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

## ■階層分子システム解析研究部門

### 計算機および生化学実験によるタンパク質分子デザイン



古賀 信康(准教授)

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

TEL: 0564-55-7379

mail: nkoga@ims.ac.jp

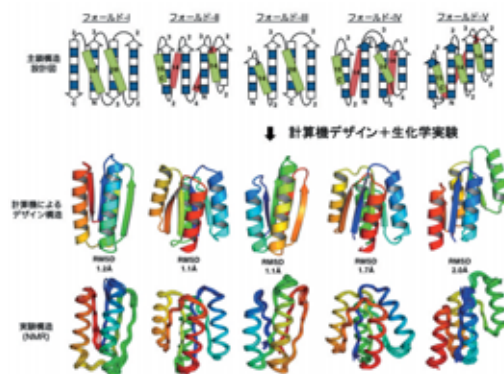
タンパク質分子は、アミノ酸配列に従ってほどけた紐のような状態から自発的に折りたたまり特異的な3次元立体構造を形成した後に、その3次元立体構造に基づき機能を発現することで、生命システムにおけるパーツとして様々な生命現象を生み出しています。現在私達が見ている自然界のタンパク質の姿は、自然が何十億年という時間をかけて精巧に創り上げた、いわば“完成品”であり、それらを解析するのみではタンパク質分子の動作メカニズムの本質を明らかにすることは困難です。そこで私達は、立体構造形成や機能発現に関する様々な仮説を立て、それらを基にタンパク質分子を計算機上でデザインし、そのデザインしたタンパク質分子が実際にどのよ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

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

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

#### 参考文献

- 1) Sarel J. Fleishman, Andrew Leaver-Fay, Jacob E. Corn, Eva-Maria Strauch, Sagar D. Khare, **Nobuyasu Koga**, Justin Ashworth, Paul Murphy, Florian Richter, Gordon Lemmon, Jens Meiler, and David Baker, RosettaScripts: A Scripting Language Interface to the Rosetta Macromolecular Modeling Suite, *PLoS ONE* 6(6), 1-10 (2011).
- 2) **Nobuyasu Koga**, Rie Tatsumi-Koga, Gaohua Liu, Rong Xiao, Thomas B. Acton, Gaetano T. Montelione and David Baker, Principles for designing ideal protein structures, *Nature* 491(7423), 222-227 (2012).
- 3) Yu-Ru Lin, **Nobuyasu Koga**, Rie Tatsumi-Koga, Gaohua Liu, Amanda F. Clouser, Gaetano T. Montelione, David Baker, Control over overall shape and size in de novo designed proteins, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 112(40), E5478-5485 (2015).



計算機による5つのトポロジーの新規立体構造デザイン

<キーワード>

タンパク質立体構造・機能

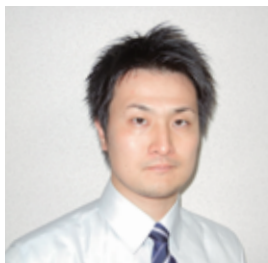
人工設計

計算機シミュレーション

生化学実験

■階層分子システム解析研究部門

新規エネルギー貯蔵・変換デバイスを指向した無機材料合成



小林 玄器(特任准教授)

2006年金沢大学工学部卒業、  
2008年東京工業大学大学院  
総合理工学研究科修士過程  
修了、2010年博士課程修了、  
博士(理学)、2010年同産学官  
連携研究員、2011年神奈川  
大学特別助手を経て、2013年  
9月より現職。2012年10月～  
2016年3月科学技術振興機構  
さきがけ「新物質科学と元素  
戦略」研究者兼任。

TEL: 0564-55-7440

mail: gkobayashi@ims.ac.jp

〈キーワード〉

無機固体化学

●  
固体イオックス

●  
電気化学

●  
エネルギー貯蔵・変換デバイス

持続可能なエネルギー社会の実現に向け、電気化学反応を利用した蓄電・発電の重要性が高まっています。現在、リチウム二次電池や燃料電池を越える次世代のエネルギーデバイスの実現を目指して、激しい開発競争が世界的に繰り広げられていますが、いまだ確たる本命は不在の状況です。次世代エネルギーデバイスには、エネルギー密度、作動温度、耐環境性能など、用途に応じたさまざまな性能が求められます。これらを達成するためには、既存の研究開発の延長線上にはない、基幹材料のブレークスルーが必要になります。これまでプロトン(H<sup>+</sup>)やリチウムイオン(Li<sup>+</sup>)、ナトリウムイオン(Na<sup>+</sup>)、マグネシウムイオン(Mg<sup>2+</sup>)、酸化物イオン(O<sup>2-</sup>)などを電荷担体を利用した燃料電池や蓄電池の開発が行われてきましたが、新たな電荷担体を伝導種とする電極や固体電解質材料が出現すると、全く新しい作動原理をもつエネルギーデバイスが創成できると期待されます。我々の研究グループでは、水素のアニオンであるヒドリド(H<sup>-</sup>)のイオン導電に着目しています。

H<sup>-</sup>は一価でO<sup>2-</sup>と同程度の適度なイオン半径を持ち、固体内での高速イオン導電が期待できます。また、卑な標準酸化還元電位(-2.25 V vs. SHE)を持つことから、H<sup>-</sup>の酸化還元反応とイオン導電現象を蓄電・発電反応に利用することができれば、

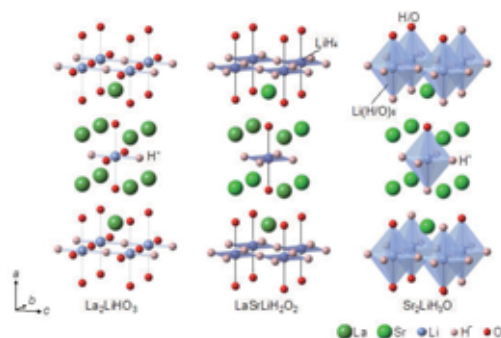
参考文献

- 1) G. Kobayashi, Y. Hinuma, S. Matsuoka, A. Watanabe, I. Muhammad, M. Hirayama, M. Yonemura, T. Kamiyama, I. Tanaka and R. Kanno, "Pure H<sup>-</sup> Conduction in Oxyhydrides," *Science* **351**, 1314-1317 (2016).
- 2) G. Kobayashi, Y. Irii, F. Matsumoto, A. Ito, Y. Ohsawa, S. Yamamoto, Y. Cui, J.-Y. Son and Y. Sato, "Improving Cycling Performance of Li[Li<sub>0.2</sub>Ni<sub>0.18</sub>Co<sub>0.03</sub>Mn<sub>0.58</sub>]O<sub>2</sub> through Combination of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-based Surface Modification and Stepwise Pre-cycling," *J. Power Sources* **303**, 250-256 (2016).
- 3) G. Kobayashi, A. Yamada, S. Nishimura, R. Kanno, Y. Kobayashi, S. Seki, Y. Ohno, H. Miyashiro, "Shift of Redox Potential and Kinetics in Li<sub>x</sub>(Mn<sub>y</sub>Fe<sub>1-y</sub>)PO<sub>4</sub>," *J. Power Sources* **189**(1), 397-401 (2009).
- 4) G. Kobayashi, S. Nishimura, M.-S. Park, R. Kanno, M. Yashima, T. Ida and A. Yamada, "Isolation of Solid Solution Phases in Size-Controlled Li<sub>x</sub>FePO<sub>4</sub> at Room Temperature," *Adv. Funct. Mater.* **19**(3), 395-403 (2009).
- 5) S. Nishimura, G. Kobayashi, K. Ohoyama, R. Kanno, M. Yashima and A. Yamada, "Experimental visualization of lithium diffusion in Li<sub>x</sub>FePO<sub>4</sub>," *Nature Mater.* **7**, 707-711 (2008).

高エネルギー密度のエネルギーデバイスが実現する可能性があります。しかし、熱的・電気化学的な安定性を備え、H<sup>-</sup>のみをイオン導電する物質はこれまでに発見されておらず、H<sup>-</sup>のイオン導電現象を蓄電・発電反応に利用する試みはありませんでした。

最近、我々の研究グループでは、H<sup>-</sup>とO<sup>2-</sup>が結晶格子内に共存する酸水素化物という物質群に着目し、H<sup>-</sup>導電性の固体電解質として機能する新物質La<sub>2-x-y</sub>Sr<sub>x+y</sub>LiH<sub>1-x+y</sub>O<sub>3-y</sub>(以下LSLHO)の開発に成功しました。さらに、LSLHOを固体電解質に用いてH<sup>-</sup>を電荷担体とする全固体型の電気化学エネルギーデバイスが作動することを世界に先駆けて見だし、H<sup>-</sup>導電を利用したデバイスの作動原理を実証しました。我々は、この研究成果によって固体イオックスと電気化学の新しい研究領域が開拓され、蓄電池や燃料電池にH<sup>-</sup>という新しい概念を導入できると期待しています。

これまでに得られた研究結果を基に、H<sup>-</sup>が結晶内を高速で拡散するH<sup>-</sup>超イオン導電体や電極材料などの新物質探索とH<sup>-</sup>導電を利用した新型電池の開発をおこなうと同時に、H<sup>-</sup>のイオン導電機構の解明など、H<sup>-</sup>導電に関する学理を確立・体系化する研究に挑んでいきます。



新規酸水素化物La<sub>2-x-y</sub>Sr<sub>x+y</sub>LiH<sub>1-x+y</sub>O<sub>3-y</sub>(x = 0, y = 0, 1, 2)の結晶構造。広い組成範囲(0 ≤ x ≤ 1, 0 ≤ y ≤ 2)を持ち、ランタン(La)とストロンチウム(Sr)の組成比を変えると結晶格子内のH<sup>-</sup>とO<sup>2-</sup>の比率を制御することが可能。



■機能分子システム創成研究部門

分子を使った新しいエレクトロニクスを開拓する



山本 浩史(教授)

1993年東京大学理学部化学  
科卒業、1998年同大学大学  
院理学系研究科博士課程  
修了、博士(理学)、1998年  
学習院大学理学部物理学科  
助手、1999年理化学研究所  
基礎科学特別研究員、2000  
年同研究員、2007年同専任  
研究員を経て、2012年4月  
より現職。東京工業大学総  
合理工学研究科連携教授・  
東北大学理学部物理学科  
教授も兼任中。

TEL: 0564-55-7334

FAX: 0564-55-7325

mail: yhiroshi@ims.ac.jp

〈キーワード〉

有機エレクトロニクス

有機FET

強相関電子系

超伝導

モット絶縁体

超分子

ナノワイヤー

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

(1) $\pi$ 電子エレクトロニクスの中でも非常に特異な性質をもつ、「強相関 $\pi$ 電子」を使ったトランジスタの開発に取り組んでいます。強相関電子系というのは、電子間のクーロン相互作用が強く働き、通常の伝導電子とは異なった振る舞いをする電子系のことです。ほんの少し電子濃度を増やしたり減らしたりするだけで、急に電子が固まって絶縁体になったり、急に流れ出して金属になったりします。(不思議なことに、 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ などの銅酸化物高温超伝導体の伝導電子はこの仲間に入ることが分かっています。)そしてFET構造の仕組みを利用して有機物界面の「強相関電子」の濃度を変化させてやると、上に述べたような現象が実際に起こって、絶縁体を金属や超伝導にスイッチ(相転移)させることが出来ます。我々は世界で初めて、こうした相転移をOFET界面において観測することに成功しました。また最近、超伝導のON/OFFを光で制御するデバイスの実現にも成功しています。

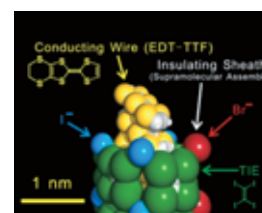
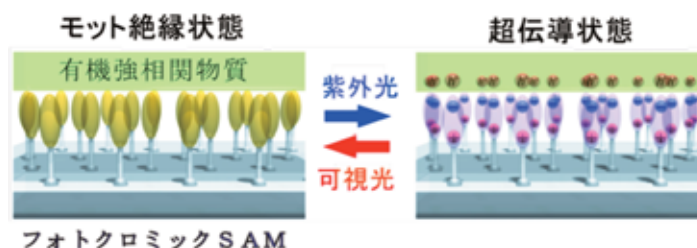
(2)近年、半導体微細加工技術が進展し、回路のハーフピッチが20nmに近づいてきました。あともう少し回路の微細化が進むと、結晶中の分子間

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

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

参考文献

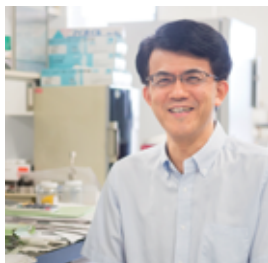
- 1) M. Suda, R. Kato, and H. M. Yamamoto "Light-induced superconductivity using a photo-active electric double layer," *Science* **347**, 743-746 (2015).
- 2) H. M. Yamamoto, M. Nakano, M. Suda, Y. Iwasa, M. Kawasaki and R. Kato "A strained organic field-effect transistor with a gate-tunable superconducting channel," *Nature Commun.* **4**, 2379/1-2379/7 (2013).
- 3) H. M. Yamamoto, Y. Kosaka, R. Maeda, J. Yamaura, A. Nakao, T. Nakamura, and R. Kato "Supramolecular Insulating Networks Sheathing Conducting Nanowires Based on Organic Radical Cations," *ACS Nano* **2**(1), 143-155 (2008).



(左図)有機モットFETにおける超伝導転移の概念図。このデバイスの場合は、紫外光を当てると有機モット絶縁体が超伝導に転移し、可視光照射で元に戻る。(右図)超分子ナノワイヤーのCPKモデルによる構造図。中央の黄色い分子が伝導性の1次元分子鎖を形成し、その周囲を緑色の絶縁分子が被覆している。

## ■機能分子システム創成研究部門

### 曲面をもつグラフェン分子の合成と機能開発



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

ベンゼンは、炭素6個と水素6個からできた六角形の分子です。この炭素リングの上を6個の電子が回っており、これによって分子が安定に存在できます。有機分子の中を自由に動き回る電子をパイ電子といい、光、電気、磁気的な機能をもたせるためには必要不可欠です。この六角形を基本とした安定な化合物を芳香族といいます。また、無数の六角形がハチの巣状につながったものがグラフェンです。グラフェンは、グラファイト(炭)を構成する一枚の平面シートに相当します。グラフェンを一部切り取ってできたものがグラフェン分子ですが、我々は、曲面をもつ特殊なグラフェン分子の合成と機能開発を目標としています。

我々が手本とする分子は、 $C_{60}$ というサッカーボール型の分子です。1990年に、炭素電極のアーク放電という方法で大量合成されました。この分子は、ひずみエネルギーが非常に大きいので、我々の得意とする有機合成で作ることは困難です。 $C_{60}$ は20個の六角形と12個の五角形からできています(図左)。この五角形のため、グラフェンのような平面ではなく、ボウル型の曲面構造になっています。 $C_{60}$ には超電導、強磁性、 $n$ 型半導体といった多くの優れた機能が見つかっています。この $C_{60}$ のユニークな性質は、その特異な構造に由来しているということが出来ます。

これまでにないユニークな機能性分子を開発するためには、これまでにない特異な構造をもった分子を設計する必要があります。しかしながら、曲面グラフェン分子は、ひずみエネルギーが大き

いため合成は容易ではありません。我々は、六角形と八角形の組み合わせで面白い分子ができないかと考え、[8]サーキュレン<sup>1)</sup>という分子を合成しました。中心の八角形のため、かなり深いサドル型の構造をしています(図中央)。この分子は、有機 $p$ 型半導体として機能することがわかっています。

最近、シクロパラフェニレンという複数のベンゼンが環状につながった分子が注目されています<sup>2)</sup>。これはカーボンナノチューブの最少単位として知られ、ナノリングと呼ばれています。ナノリングは分子の末端がなく、対称性が高いことが特徴です。パイ電子の自由度も大きいため、優れた電子物性が期待されています。我々はシクロパラフェニレンに光電子的な機能を与えることを目的として、カルバゾール4個からなるナノリングを開発しました(図右)<sup>3)</sup>。ナノリングには比較的大きな内部空間があり、 $C_{60}$ などの分子を内包する機能があることも分かっています。

#### 参考文献

- 1) Y. Sakamoto and T. Suzuki, "Tetrabenzo[8]circulene: Aromatic Saddles from Negatively Curved Graphene," *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 14074-14077 (2013).
- 2) T. Iwamoto, Y. Watanabe, Y. Sakamoto, T. Suzuki and S. Yamago, "Selective and Random Syntheses of [n]Cycloparaphenylenes ( $n=8-13$ ) and Size Dependence of Their Electronic Properties," *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 8354-8361 (2011).
- 3) Y. Kuroda, Y. Sakamoto, T. Suzuki, E. Kayahara and S. Yamago, "Tetracyclo(2,7-carbazole)s: Diatropicity and Paratropicity of Inner Regions of Nano hoops," *J. Org. Chem.* **81**, 3356-3363 (2016).

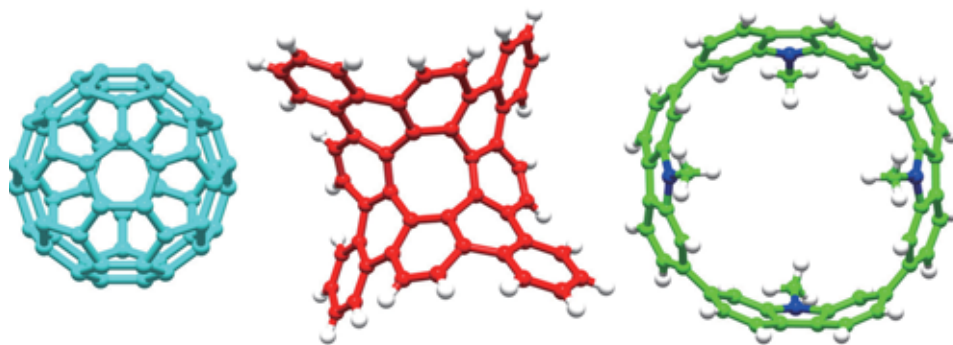


図  $C_{60}$ (左)、[8]サーキュレン(中央)、およびナノリング(右)の分子構造

<キーワード>

有機半導体

•  
サーキュレン

•  
ナノリング

■ 繊細計測研究部門

新しい光学顕微鏡でナノ物質の励起状態とキラリティを調べる



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。  
2016年7月より研究総主幹、  
およびメゾスコピック計測研究  
センター長。  
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

キラリティ

従来の光学顕微鏡では、光の波長(可視光で0.5  $\mu\text{m}$ 程度)より小さい形を見ることができませんでしたが、近接場光学顕微鏡という新しい方法によってナノメートル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(スペクトル情報)を撮ることができ、また100兆分の1秒単位の極めて短い時間内に起きる変化を、刻一刻、場所ごとに調べることもできます。私たちは、貴金属で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。更に、円偏光という螺旋の性質を持つ光で近接場計測をすることで、後で述べるキラリティという性質を、ナノ物質について場所ごとに調べることもできるようになりました。このようにナノ物質の新しい性質を光で調べ、制御する基礎的な研究を行っています。

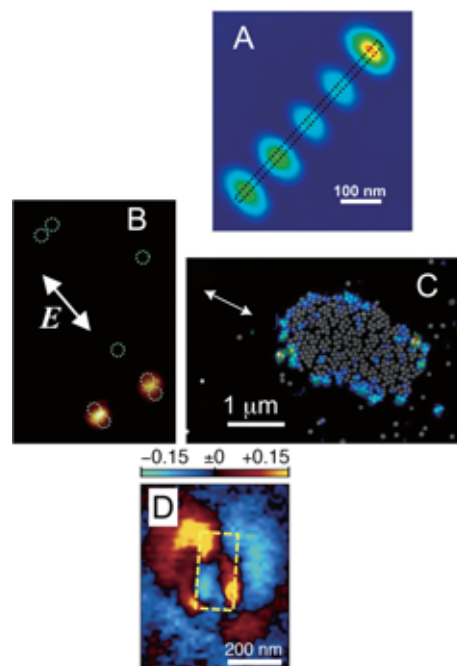
貴金属ナノ微粒子をある一定の構造で集合させて配列構造を作ると、光を照射したときに、局所的に非常に強い光(金属微粒子のない場合に比べて、最大数百万倍)が発生する場合がありますと考えられています。通常の光学顕微鏡ではこのような光の場を観察することはできませんが、私達は近接場光学顕微鏡を用いて、発生した強い光の場を、実際にイメージとして観察しました。例えば微粒子が2個連結した構造では、粒子間の隙間に強い光が発生して

いるのが観察され、これは理論による予測によく一致します。また最近、同じ近接場光学顕微鏡を用いた実験で、ナノサイズの孔を通ってくる光が、孔に金属板で蓋をすると、かえって強くなるという、奇妙な現象を見いだしました。解析の結果、貴金属の微粒子が光を集める特異な性質が、この現象に深く関わるということがわかってきました。

物質には、それ自身とそれを鏡で映したものとが同一でないものがあります。生命を作っているタンパク質分子などは全てそのような物質です。このような自身と鏡像が同一でない特性をキラリティといいます。キラリティのある物質は、左巻き螺旋の円偏光と、右巻きの円偏光に対する応答が異なるため、円偏光を使ってキラリティを調べることができます。私たちは、近接場光学顕微鏡に円偏光を組合せて、ナノ物質の場所ごとのキラリティを調べることができるようになりました。従来の計測法では物質の全体としてのキラリティしかわからなかったのが、私たちの方法では局所的なキラリティが観察でき、今まで隠れていた物質のキラリティが明らかになってきています。生命に関わる分子の研究への応用も考えられます。このような研究を進展させて、ナノ構造物質の励起状態やキラリティに関わる分子科学を進展させて行きたいと考えています。

参考文献

- 1) H. Okamoto and K. Imura, "Visualizing the Optical Field Structures in Metal Nanostructures," *J. Phys. Chem. Lett.* **4**, 2230-2241 (2013).
- 2) H. Okamoto, T. Narushima, Y. Nishiyama, and K. Imura, "Local Optical Responses of Plasmon Resonances Visualised by Near-Field Optical Imaging," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 6192-6206 (2015).
- 3) 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: 金長方形構造の円偏光によるイメージ。黄色と青は逆符号のキラリティを示す。長方形はキラリティがないが、局所的には大きなキラリティがあることが可視化された。



■ 繊細計測研究部門  
マイクロ固体フォトニクスの研究



平等 拓範(准教授)

1983年福井大学卒、1985年福井大学大学院修士課程修了、同年三菱電機(株)LSI研究所研究員、1989年福井大学工学部助手、1998年2月より現職、東北大学博士(工学)。1993年~1994年文部省長期在外研究員(スタンフォード大学応用物理学科)、2005年パリ第6大学客員教授、2010年ジョゼフ・フーリエ大学客員教授、2013年パリ高等化学学校(ENSCP-Chimie ParisTech)客員教授、2007年~2014年豊橋技術科学大学客員教授、2004年平成16年度文部科学大臣賞(第30回研究功績者)、2008年(財)光産業技術振興協会 第24回櫻井健二郎氏記念賞、2010年米国光学会(OSA)フェロー、2012年国際光工学会(SPIE)フェロー、2014年米国電気電子学会(IEEE)フェロー。

OSA, Council, Board of Meeting.  
TEL: 0564-55-7346

FAX: 0564-53-5727

mail: taira@ims.ac.jp

(キーワード)

マイクロチップレーザー

非線形光学

マイクロドメイン

セラミックレーザー

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

本研究グループは、光の波長と同程度のマイクロオーダーで光学材料の性質を制御する事により光波を発生・制御する“マイクロ固体フォトニクス”に関する研究を展開してきました。図1に示すマイクロドメインを制御した新たな固体レーザーによる高性能化が期待されます。すなわち、マイクロチップ共振器(1990年Nd:YVO<sub>4</sub>、1993年Yb:YAG、1997年セラミックYAGなど)<sup>1-5)</sup>による高コヒーレント光発生、相関制御による高輝度温度のジャイアントパルス発生(ジャイアントマイクロフォトニクス)、コヒーレンス長に合せマイクロドメインの非線形分極を制御する擬似位相整合(Quasi phase matching, QPM)<sup>6)</sup>による非線形光学波長変換(1998年バルクPPMgLNなど)などです。そしてこの手法を用いたレーザー素子により、ジャイアントパルス光によるレーザー点火、金属加工を可能とする高出力レーザー、アト秒が望める非線形波長変換超短パルス、高い分解能を有する中赤外光源<sup>7)</sup>ポータブルテラヘルツ光源<sup>8)</sup>などが望めるようになりました。興味深いことにマイクロチップレーザーは、従来のメガワット出力レーザーで困難であった、サブナノ秒からピコ秒領域、すなわち従来のパルスギャップ領域(図2)に直接アクセスできます。しかも単色性が高いため物質と強く相互作用でき、種々の非線形現象を引き起こせます。何にせよ、従来は自由に発生できなかった時間領域ですから、これまで見逃していた新現象などの探索に有効です。そして、アト秒やそれよりも短い未踏の超短パルス発生にも重要であるとされるなど、マイクロ固体フォトニクスによる時間領域における新展開が期待されます。<sup>2,5)</sup> 高出力化、高輝度化とともに波長域の開拓を進めてきた結果、手のひらサイズの光源により紫外域からTHz波領域までの広帯域光の発生が可能になりつつあります。(図3)

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

参考文献

- 1) T. Taira, A. Mukai, Y. Nozawa and T. Kobayashi, *Opt. Lett.* **16**, 1955-1957 (1991).
- 2) 平等拓範, 日本学術振興会 光エレクトロニクス第130委員会編「光エレクトロニクスとその応用」オーム社, pp. 177-189, pp. 189-222, pp. 247-266, pp. 289-314, pp. 422-442 (2011.5); レーザー学会編「先端固体レーザー」オーム社, pp. 33-96, pp. 97-147 (2011.12).
- 3) T. Taira, J. Saikawa, T. Kobayashi and R. L. Byer, *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* **3**, 100-104 (1997).
- 4) T. Taira, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **13**, 798-809 (2007). **INVITED**
- 5) T. Taira, **[INVITED]**, *Opt. Mater. Express* **1**, pp. 1040-1050 (2011); D. G. Rowe, "OUT OF THE LAB: Lasers for engine ignition," *Nature photonics* **2**, 515-517 (2008); **OSA News Release** <[http://www.osa.org/en-us/about\\_osa/newsroom/news\\_releases/2011/lasersparksrevolution/](http://www.osa.org/en-us/about_osa/newsroom/news_releases/2011/lasersparksrevolution/)>, **BBC News** <<http://www.bbc.co.uk/news/science-environment-13160950>>.
- 6) H. Ishizuki and T. Taira, "Half-joule output optical-parametric oscillation by using 10-mm-thick periodically poled Mg-doped congruent LiNbO<sub>3</sub>," *Opt. Express* vol. **20**, no.18, pp. 20002-20010 (2012).
- 7) M. Miyazaki, J. Saikawa, H. Ishizuki, T. Taira, and M. Fujii, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11**, pp. 6098-6106 (2009).
- 8) S. Hayashi, K. Nawata, T. Taira, J. Shikata, K. Kawase, and H. Minamide, "Ultrabright continuously tunable terahertz-wave generation at room temperature," *Scientific Reports* **4**:5045 (2014). DOI: 10.1038/srep05045.
- 9) T. Taira, T. Y. Fan, and G. Huber, "Introduction to the Issue of Solid-State Lasers" *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **21**, 0200303 (2015).



図1: マイクロドメイン制御

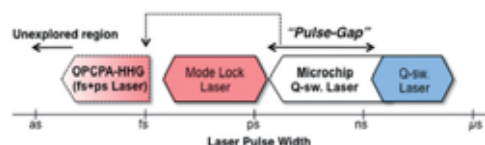


図2: 高強度レーザーのパルスギャップとこの充実により拓かれる新たな時間領域

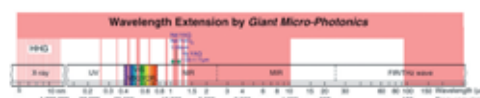
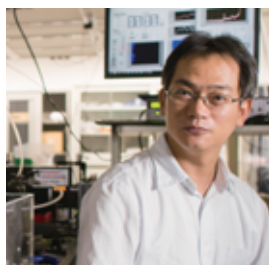


図3: マイクロ固体フォトニクスの進展(ジャイアントマイクロフォトニクス)により可能となった波長域

## ■ 広帯域相関計測解析研究部門 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

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

光は電磁波の一種であり、ラジオの電波やX線の仲間ですが、その波の形を実際に観測するという事は、容易ではありません。目に見える光(可視光)の周波数は数百テラヘルツ( $\text{THz}=10^{12}\text{Hz}$ )であり、その周期は1,2フェムト秒( $\text{fs}=10^{-15}\text{s}$ )と、非常に高速だからです。以前は、光の波を計測する手段として、極端紫外光であるアト秒( $\text{as}=10^{-18}\text{s}$ )パルスを利用したものがありませんでした[*Science* 305 1257]。しかし、極端紫外光は、大気で吸収されてしまうので、高真空装置などが必要であり、一般的な応用は考えられませんでした。

藤グループにおいて、2013年に、光の波の振動の様子を直接計測する新しい光技術を開発しました。<sup>1,2)</sup> この光電場計測技術は、アト秒パルスを必要とせず、測定したい光波そのものを利用して、光の

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

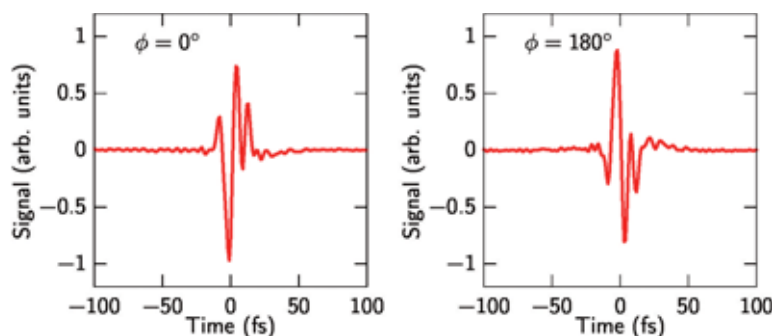
現在、光ファイバーによる通信では、光の振幅や位相の変調によって、情報をのせています。もし、光電場の波形そのものに情報をのせた通信を行うことができれば、今よりも3桁以上高速に通信ができるようになります。そのような通信技術の実現において、藤グループで開発された光電場の計測技術は極めて重要になると考えられます。

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

#### 参考文献

- 1) Y. Nomura, H. Shirai, and T. Fuji, "Frequency-resolved optical gating capable of carrier-envelope phase determination," *Nat. Commun.* **4**, 2820 (2013).
- 2) Y. Nomura, Y.-T. Wang, A. Yabushita, C.-W. Luo, and T. Fuji, "Controlling the carrier-envelope phase of single-cycle mid-infrared pulses with two-color filamentation," *Opt. Lett.* **40**, 423-426 (2015).
- 3) T. Fuji, Y. Nomura, and H. Shirai, "Generation and characterization of phase-stable sub-single-cycle pulses at  $3000\text{ cm}^{-1}$ ," *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **21**, 8700612 (2015).

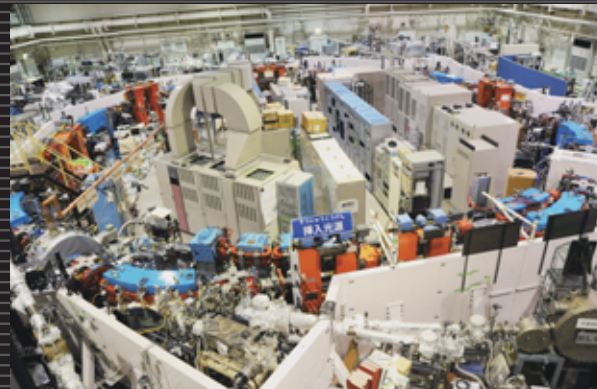
- 4) H. Shirai, C. Duchesne, Y. Furutani, and T. Fuji, "Attenuated total reflectance spectroscopy with chirped-pulse upconversion," *Opt. Express* **22**, 29611-29616 (2014).
- 5) H. Shirai, T.-T. Yeh, Y. Nomura, C.-W. Luo, and T. Fuji, "Ultrabroadband Midinfrared Pump-Probe Spectroscopy Using Chirped-Pulse Up-conversion in Gases," *Phys. Rev. Appl.* **3**, 051002 (2015).
- 6) T. Fuji, H. Shirai, and Y. Nomura, "Ultrabroadband mid-infrared spectroscopy with four-wave difference frequency generation," *J. Opt.* **17**, 094004 (2015), Highlight of 2015.



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

## 極端紫外光研究施設 (UVSOR)

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



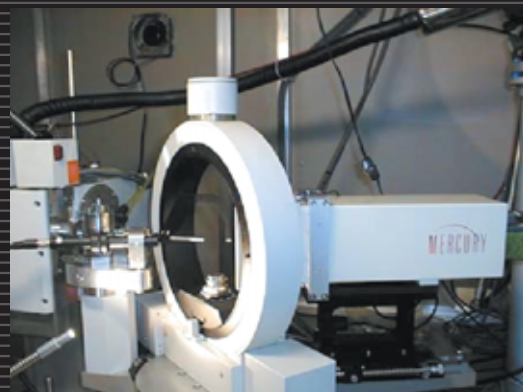
UVSOR施設



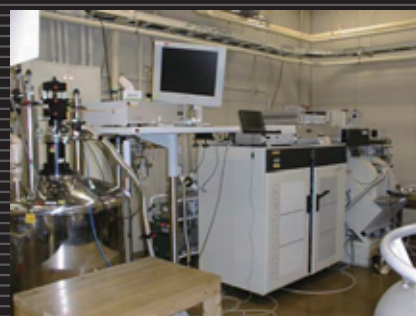
UVSORのシンクロトロン光を用いた走査型透過X線顕微鏡装置

## 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。また大学連携研究設備ネットワーク事業を推進し、各種講習会の実施や、機器利用の予約・課金webシステムを提供し、全国的な汎用機器の共同利用を支援しています。平成27年度からはナノプラットフォーム事業が統合され、施設利用による共用設備運用に加えて、協力研究を通じて多くの先端機器が利用可能となっています。



CCD単結晶X線解析計



高周波・高磁場電子スピン共鳴装置



## 装置開発室

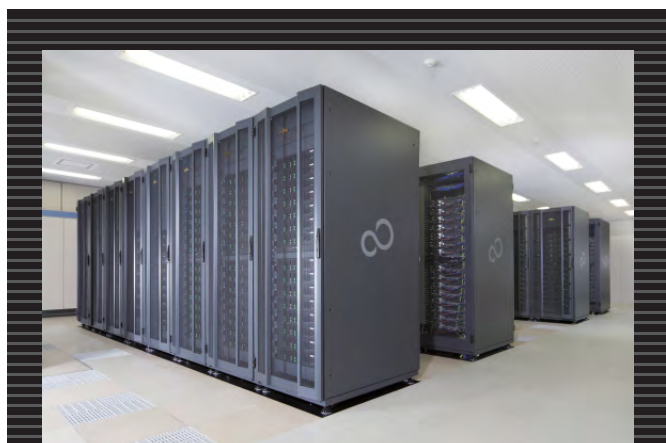
装置開発室では、分子科学研究に必要な様々な実験装置の製作・開発を行っています。機械、エレクトロニクス、微細加工などの設備を有し、高度な技術・技能を有する技術者が配属されています。研究所創設当初から、所内外の研究者と密接に連携し、独創的な研究を可能とする様々な実験装置の開発を手掛けてきました。将来の分子科学研究を支えるために、より先進的な技術の習得にも積極的に取り組んでいます。研究者や学生に対して機械加工や電子回路工作に関する講習会を開催し、技術の普及にも努めています。



## 岡崎共通研究施設

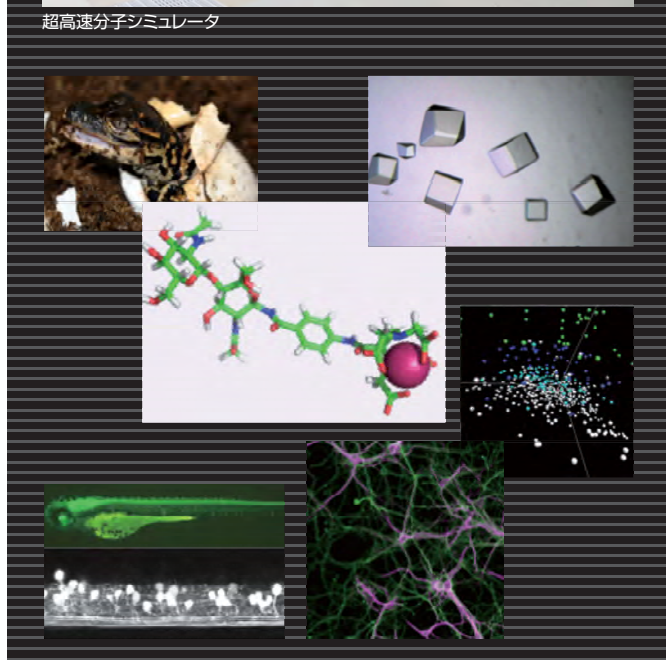
### 計算科学研究センター

我が国唯一の分子科学分野の理論計算科学研究のための共同利用施設です。先導的な学術研究の発信はもとより、岡崎地区の3研究所と全国の分子科学とバイオサイエンスの研究者に対して、大学等では不可能な大規模計算を実行できるハード環境と様々なプログラムソフトを提供しています。平成23年度導入の「超高速分子シミュレータ」に加え、平成24年度には「高性能分子シミュレータ」も導入し、大規模な計算が実行できる環境を提供しています。平成29年度中旬に全システムを更新予定です。



### 岡崎統合バイオサイエンスセンター

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

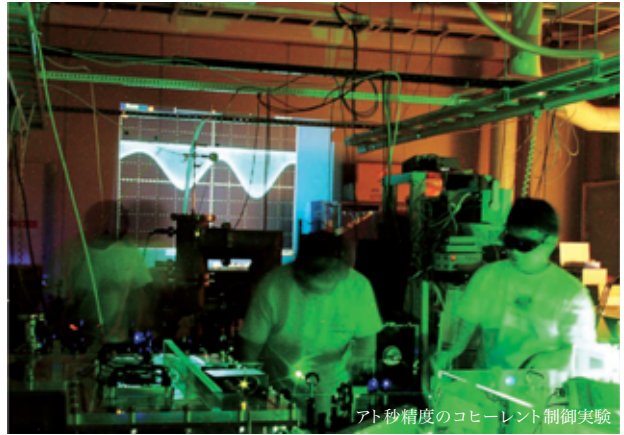


## 先端的な研究を推進する拠点事業

分子科学研究所は他大学や研究機関と連携し、様々なプロジェクトを推し進めています。光分子科学研究に関連するものとしては、大阪大学・京都大学・日本原子力研究開発機構との連携による融合光新創世ネットワークを推進しています。この事業では、レーザーを活用して最先端の光を作り出し、物質の量子的な性質の詳細な観察と高度な制御を実現することを目指しています。



◀「融合光新創世ネットワーク」が主催したシンポジウムの模様



## 計算分子科学研究関係のプロジェクト

計算物質科学研究に関連する事業として、ポスト京の重点課題⑤「エネルギーの効率的な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」、元素戦略プロジェクト(触媒・電池材料)理論グループ、計算物質科学人材育成コンソーシアム(分子科学)が実施されています。また、これらのプロジェクト間の相互の円滑な連携・運営のために

計算分子科学総合研究拠点を設置し、計算科学研究センターの協力のもと、分子科学分野の人材育成などを行っています。さらに、計算分子科学統合研究拠点を通して物性物理学や材料科学分野との連携も行っています。

## 国内の研究者への共同研究・共同利用支援に関する事業

国内・海外の研究者が分子研を訪れ、施設や機器を利用しています。

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

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



### ■ 共同利用研究実施一覧 平成28年度

実施内容	件数	人数
課題研究	2	29
協力研究	82	176
研究会	7	125
若手研究会等	1	14
岡崎コンファレンス	3	113
装置開発施設利用	2	6
電子計算機施設利用	221	813
UVSOR施設利用	142	762
所長招へい	78	78
ナノプラット協力研究	65	161
ナノプラット施設利用	213	648
合計	816	2,925

## 大学連携研究設備ネットワークの構築

分子科学研究所は、広く国内の研究者がインターネットを通じて大学の研究設備を有効に活用するための組織である「大学連携研究設備ネットワーク」による設備相互利用と共同研究の促進」事業の中核機関を務めています。本ネットワークには、全国の大学や企業を含めた130以上の機関が参加しており、1,700台以上の研究設備の利用案内とそのうち500台以上の設備についての利用予約・課金システムを運用しています。1万人を超える研究者がユーザーとして登録されており、毎月10,000件以上の利用実績があります。一部は依頼計測も可能です。自前で高価な装置を購入することなく先端測定が行える研究支援事業として広く有効に活用されています。



大学連携研究設備ネットワークの概念

## ナノテクノロジープラットフォーム分子・物質合成

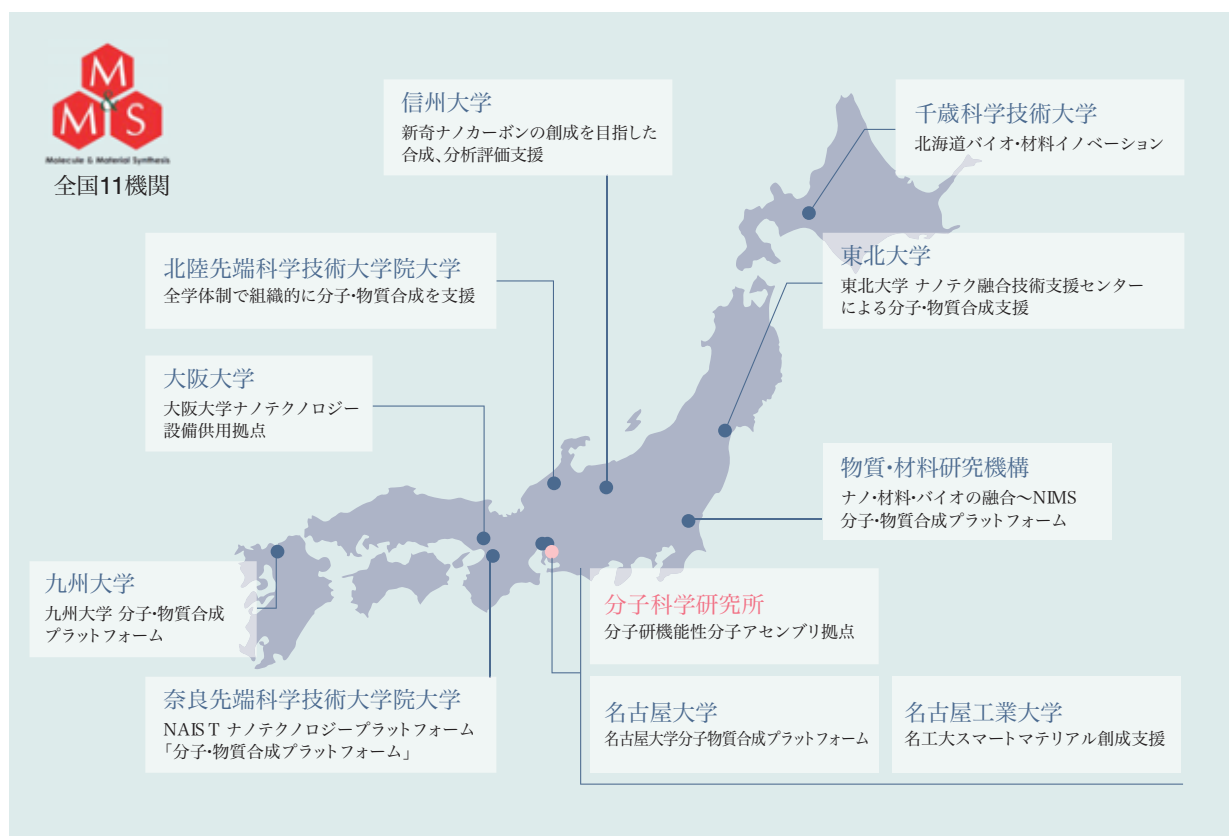
平成24年度から始まった文科省ナノテクノロジープラットフォーム事業は、最先端の研究設備とその活用のノウハウを有する機関が緊密に連携して全国的な設備の共用体制を共同で構築し、産業界や研究現場が有する技術的課題の解決へのアプローチを提供するとともに産学官連携や異分野融合を推進するものです。本事業では、

微細構造解析、微細加工、分子・物質合成の3つの全国規模のプラットフォームが構築され、分子研は、分子・物質合成の代表機関と実施機関を担い、高性能かつ安全安心な次世代分子物質材料創成のための研究支援を実施しています。詳細は下記URLにアクセスの上ご参照ください。

[事業全体] <https://nanonet.go.jp/>

[代表機関] <http://mms-platform.com/>

[分子研] <http://nanoims.ims.ac.jp/ims/>





## 世界に広がるネットワークの構築

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

### 国際共同研究拠点の形成、若手研究者の人材育成

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

外国人研究者の国別内訳(平成27年度)

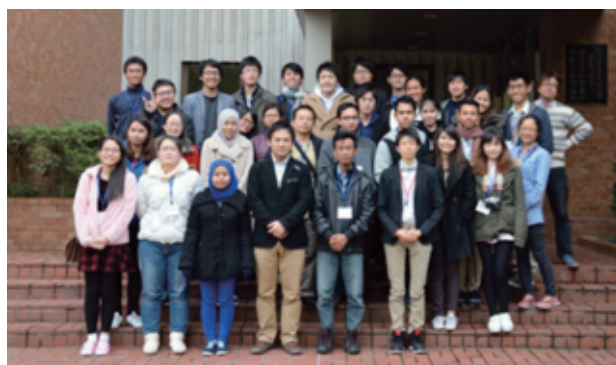
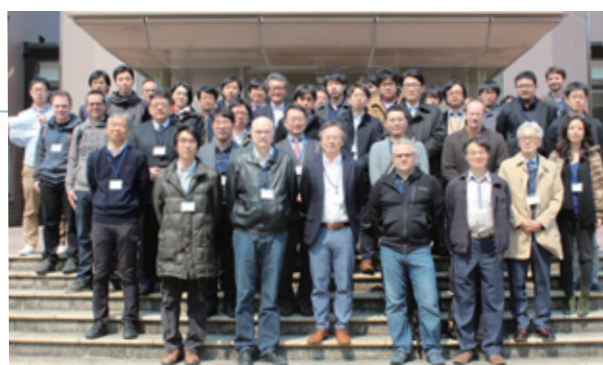
アメリカ	10	チェコ	1
イギリス	6	台湾	12
イラン	3	中国	27
インド	15	ドイツ	17
オーストラリア	2	フィリピン	4
オランダ	2	フィンランド	3
カナダ	2	フランス	16
韓国	8	マレーシア	3
スウェーデン	1	プエルトリコ	1
タイ	12	ブラジル	1

合計 146(人)

### 岡崎コンファレンス

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

第78回岡崎コンファレンス▶



### 分子研アジア国際インターンシップ・プログラム IMS-IIPA

21世紀東アジア青少年交流計画(JENESYS)の後継事業として、アジア諸国(特にタイ、マレーシア、シンガポール)の若手研究者を1～6ヶ月招聘し、研究室での研究体験と成果発表による人材育成を行っています。

◀総研大アジア冬の学校(IMS-IIPAの成果をポスター発表)



### アジア地域における研究拠点との連携

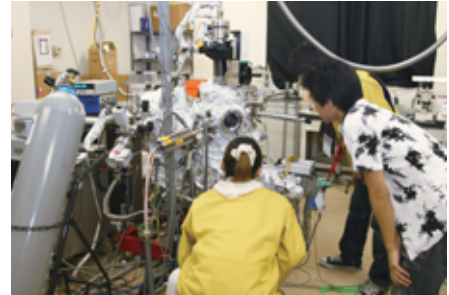
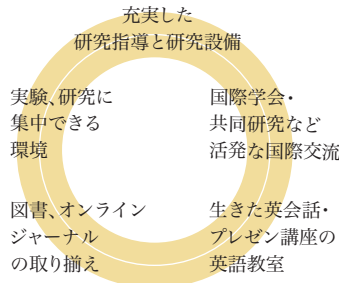
東アジア地域の研究機関との交流を積極的に推進するために、IMSアジアコア・プログラム(中国ICCAS、台湾IAMS、韓国KAISTと共催)やJSPSアジア科学セミナー(インドIACS&IISERと共催)を開催したほか、各研究拠点とのジョイントシンポジウム(タイ/チュラロンコン大学などと共催)を行っています。

◀アジア科学セミナー(インド/IISER Kolkata)

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

## 総合研究大学院大学

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



### 研究所で学ぶためには

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

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

### 大学院生経済支援制度

全年次の学生対象に「リサーチアシスタント (RA) 制度」として経済的支援を行っております。さらに、構造分子科学専攻・機能分子科学専攻に所属する学生の中でも、特に優れた研究能力および将来において研究者となる意欲を有する学生に対し「分子研究所SRA支援制度 (SRA Support)」として特別時間給を支給いたします。



詳しくはこちらをご覧ください。 <https://www.ims.ac.jp/education/support.html>

### 総合研究大学院大学とは？

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



### 研究所を知るには

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

分子科学研究所オープンキャンパス  
(6月3日)

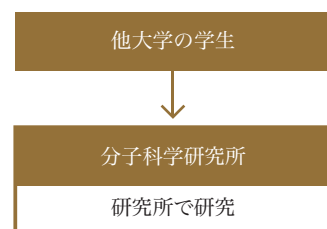
夏の体験入学  
(8月7日～8月10日)

大学院生のための公開講座  
(夏季・冬季休業期間)

## 特別共同利用研究員

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

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





## ■自然科学研究機構 岡崎共通施設

### 岡崎情報図書館

<http://www.lib.orion.ac.jp/>

岡崎情報図書館は、岡崎3研究所の図書、雑誌等を収集・整理・保存し、機構の職員、共同利用研究者等が利用できます。

[主な機能]

◎情報検索サービス

Web of Science, SciFinder 等



### 岡崎コンファレンスセンター

<http://www.orion.ac.jp/occ/>

学術の国際的及び国内的交流を図り、機構の研究、教育の進展に資するとともに、社会との連携、交流に寄与することを目的とした施設です。大会議室200名、中会議室112名、小会議室(2室)各50名の利用ができます。

### 岡崎共同利用研究者宿泊施設

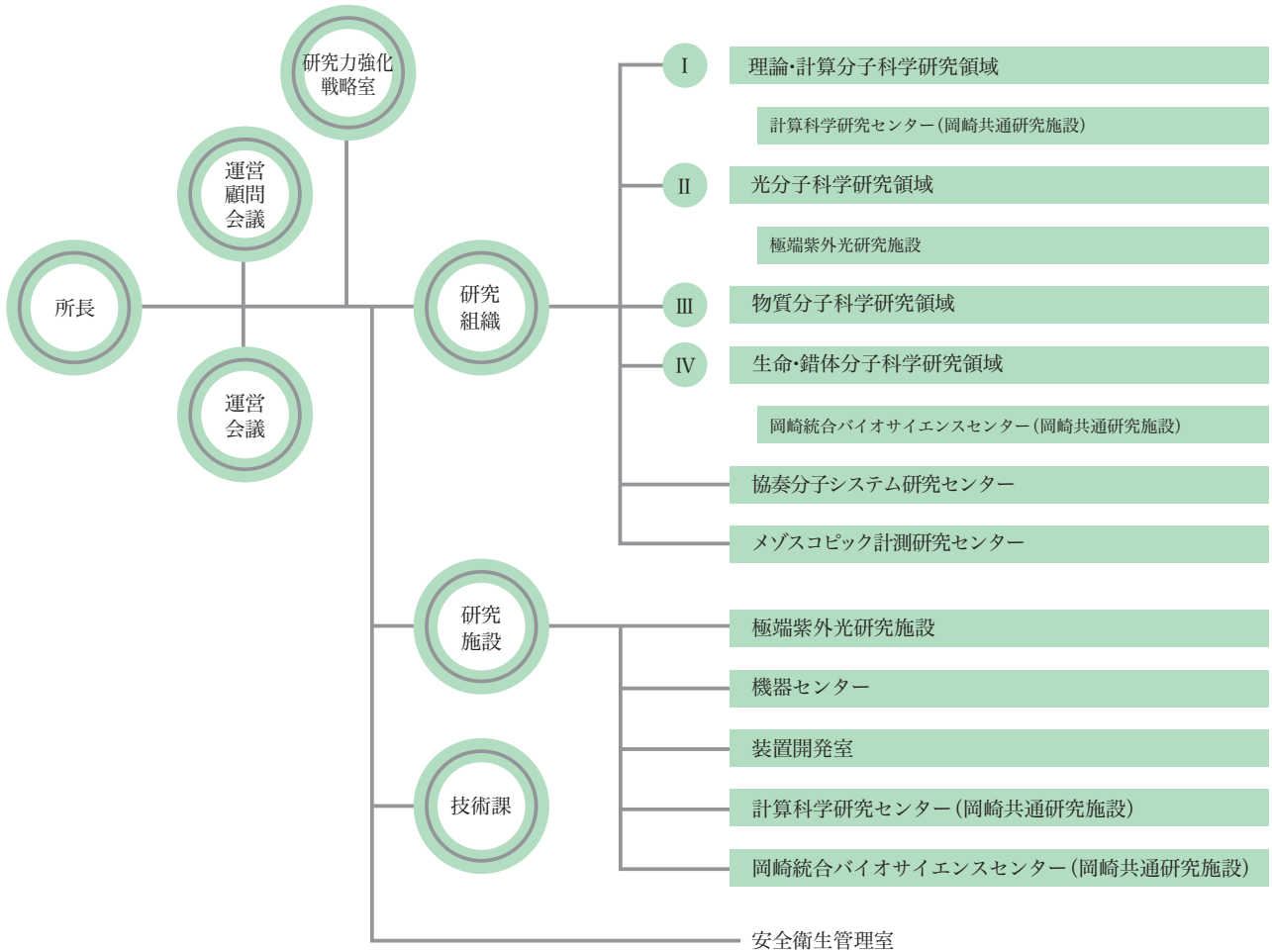
<http://www.orion.ac.jp/lodge/>

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





## 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、安全衛生管理や広報・研究者支援・国際化などの活動は、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2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3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、以降は物理科学研究科)  
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  
(～平成29年3月)  
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(岡崎統合バイオサイエンスセンター、計算科学研究センター)

- 平成14年4月  
分子スケールナノサイエンスセンター設置  
(～平成25年3月)
- 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
- 平成25年4月  
協奏分子システム研究センター設置
- 平成29年4月  
メゾスコピック計測研究センター設置

運営

■顧問

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

[研究顧問]

中嶋 敦 慶應義塾大学理工学部教授  
Hrvoje Petek (米国ピッツバーグ大学教授)

[運営顧問]

菊池 昇 株式会社豊田中央研究所代表取締役所長  
晝馬 明 浜松ホトニクス株式会社代表取締役社長  
瀧川 仁 東京大学物性研究所長・教授  
松本 吉泰 京都大学大学院理学研究科教授

■運営会議

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

[運営会議委員]◎…議長 ○…副議長

○有賀 哲也 京都大学大学院理学研究科副学長  
大西 洋 神戸大学理学研究科教授  
米田 忠弘 東北大学多元物質科学研究所教授  
鈴木 啓介 東京工業大学理学院化学系教授  
高田 彰二 京都大学大学院理学研究科教授  
高原 淳 九州大学先端物質化学研究所教授  
田原 太平 理化学研究所主任研究員  
西原 寛 東京大学大学院理学系研究科教授  
森 初果 東京大学物性研究所教授  
山口 茂弘 名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所教授

青野 重利 岡崎総合バイオサイエンスセンター教授  
秋山 修志 協奏分子システム研究センター教授  
魚住 泰広 生命・錯体分子科学研究領域教授  
大森 賢治 光分子科学研究領域教授  
◎岡本 裕巳 メゾスコピック計測研究センター教授  
加藤 晃一 岡崎総合バイオサイエンスセンター教授  
解良 聡 光分子科学研究領域教授  
小杉 信博 光分子科学研究領域教授  
斉藤 真司 理論・計算分子科学研究領域教授  
山本 浩史 協奏分子システム研究センター教授  
横山 利彦 物質分子科学研究領域教授

運営会議に、次の人事選考部会及び共同研究専門委員会を置きます。

[人事選考部会]○…部会長

有賀 哲也(京大院副学長) 秋山 修志(分子研教授)  
田原 太平(理研主任研究員) 岡本 裕巳(分子研教授)  
西原 寛(東大院教授) 加藤 晃一(統合バイオ教授)  
森 初果(東大教授) 解良 聡(分子研教授)  
山口 茂弘(名大教授) ○山本 浩史(分子研教授)

[共同研究専門委員会]○…委員長

大西 洋(神大院教授) 魚住 泰広(分子研教授)  
中澤 康浩(阪大院教授) ○青野 重利(統合バイオ教授)  
北川 宏(京大院教授) 西村 勝之(分子研教授)  
高橋 聡(東北大教授) 鈴木 敏泰(分子研教授)  
真司(分子研教授) 藤 貴夫(分子研教授)  
小杉 信博(分子研教授)

■学会等連絡会議

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

棚瀬 知明(奈良女子大院教授) 雨宮 健太(高工ネ研教授)  
黒田 一幸(早稲田大院教授) 岩田 耕一(学習院大教授)  
北川 進(京大高等院特定教授) 大内 幸雄(東工大院教授)  
八島 栄次(名大院教授) 高橋 聡(東北大教授)  
杉田 有治(理研主任研究員) 菱川 明栄(名大教授)  
東 正樹(東工大院教授) 藤井 朱鳥(東北大院准教授)  
陰山 洋(京大院教授) 吉澤 一成(九大教授)

飯野 亮太(分子研教授)  
岡本 裕巳(分子研教授)  
解良 聡(分子研教授)  
榎山 儀恵(分子研教授)  
柳井 毅(分子研教授)

■教授会議

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

中期計画

文部科学大臣から提示された平成28年度から平成33年度までの第3期中期目標に対して、自然科学研究機構として第3期中期計画を立てました。中期計画を着実に実行するために毎年、年度計画を立て、年度終了後、実績報告書を文部科学省に提出することになっています。分子科学研究所は研究者個人の自由な発想に基づく基礎学術研究を中心に据えた研究所です。研究の神髄は計画通りに行かない意外性にあります。そのため、分子科学研究を支えている種々の研究設備も、限定した目的のためのものではなく、学問の多様性に対応できるものになっています。以下は、このような背景で立案した分子科学の研究分野の中期計画(抜粋)です。

分子科学分野において、物質・材料の基本となる様々な分子及び分子システムの構造、機能、反応に関して、原子・分子及び電子のレベルで研究します。

それによって、化学現象の法則を発見するとともに、一般化して新たな現象や機能を予測、実現します。

- (1) 理論的・計算化学的方法により、様々な分子システムの構造・性質とその起源を解明するとともに、新たな機能開拓に向けた研究を行います。
- (2) 高度な光源や先端的分光法の開発を行うとともに、分子システムに内在する高次機能の機構解明や光制御に関する研究を行います。
- (3) 新規な電氣的・磁氣的・光学的特性や高効率な物質変換・エネルギー変換を目指して、分子物質や化学反応系の設計・開発を行います。

人員・予算

人員 (平成29年4月1日現在)

(単位:人)

平成28年度決算額

平成28年度外部資金受入状況<sup>※1</sup>

(単位:千円)

区分	所長	教授	准教授	助教	小計	技術職員	合計
所長	1	—	—	—	1	—	1
研究領域	—	12(7)	10(7)	31	53(14)	—	53(14)
研究施設	—	4	8	16	28	—	28
技術課	—	—	—	—	—	31	31
合計	1	16(7)	18(7)	47	82(14)	31	113(14)

区分	決算額
人件費	1,173,853
運営費・設備費	2,136,073
施設費	31,528
合計	3,341,454

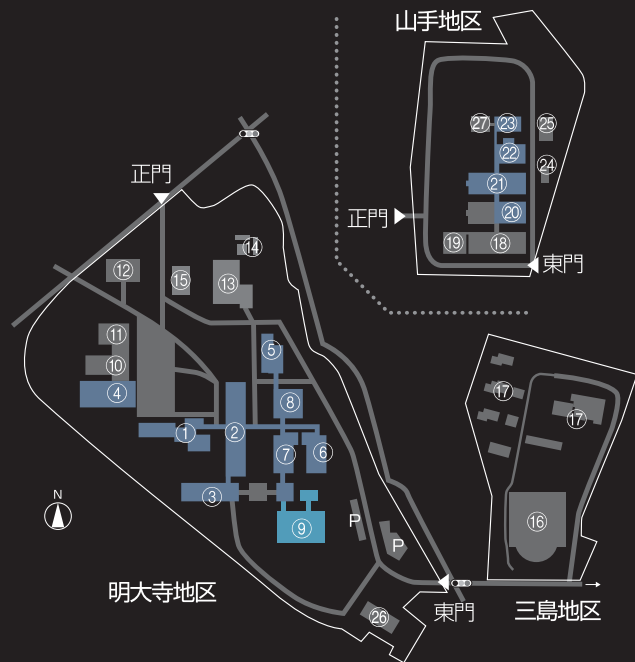
(単位:千円)

区分	合計	
科学研究費助成事業等 <sup>※2</sup>	496,756	
共同研究	46,823	
受託研究 <sup>※3</sup>	戦略的創造研究推進事業等(JST)	237,665
	科学技術振興調整費等(文科省)	586,875
	その他	97,877
小計	922,417	
合計	1,465,996	

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

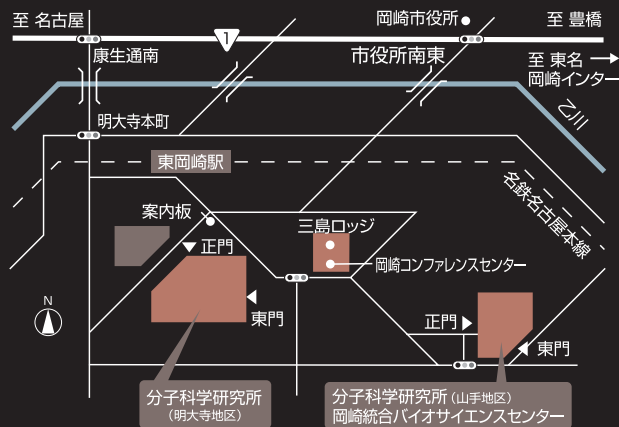
※1 左記決算額に含む。 ※2 間接経費を含む。  
※3 受託事業及び間接経費を含む。共通研究施設を除く。

## 所内案内



施設	面積 m <sup>2</sup>
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 レーザー棟	1,053
⑧ 装置開発棟	1,260
⑨ 極端紫外光実験棟	3,097
⑩ 事務センター棟	2,371
⑪ 図書館	2,002
⑫ 職員会館	1,575
⑬ エネルギーセンター	1,514
⑭ 廃棄物貯蔵庫	60
⑮ 警備員室	131
⑯ 岡崎コンファレンスセンター	2,863
⑰ 三島ロッジ	4,079
⑱ 山手1号館A	4,674
⑲ 山手1号館B	2,303
⑳ 山手2号館	8,453
㉑ 山手3号館	10,757
㉒ 山手4号館	3,813
㉓ 山手5号館	664
㉔ 実験排水処理施設	111
㉕ 高圧配電施設	440
㉖ 明大寺ロッジ	1,023
㉗ IBBPセンター棟	492

## アクセス



### ■ 東京方面から

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

### ■ 大阪方面から

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

### ■ 中部国際空港から

名鉄空港線:中部国際空港駅から名古屋方面に乗り、神宮前で豊橋方面に乗り換え東岡崎で下車(中部国際空港-東岡崎間約60分)、南口より徒歩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。



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

明大寺地区:〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地  
 山手地区:〒444-8787 愛知県岡崎市明大寺町字東山5-1  
 TEL.0564-55-7000 FAX.0564-54-2254  
<http://www.ims.ac.jp/>