



## 先端的ナノ顕微分光によって 極微物理化学のフロンティアを切り開く

くまがい・たかし

2011年 京都大学大学院理学研究科化学専攻 博士後期課程修了 (理学博士)

2011年 日本学術振興会 海外特別研究員 (フリッツ・ハーバー研究所)

2013年 フリッツ・ハーバー研究所 グループリーダー

2016年 科学技術振興機構 さきがけ研究者 兼務 (2020年まで)

2020年 分子科学研究所 准教授 (兼任) (2021年3月まで)

2020年 北海道大学 客員准教授

2021年 分子科学研究所 准教授・総合研究大学院大学 准教授

2021年4月1日付でメゾスコピック計測研究センターに着任しました。こちらへ来る前はドイツのベルリンにあるFritz-Haber Institute (FHI) にいましたので、2019年から始まったコロナ禍の影響が直撃する中での異動となりました。世界的に状況 (生活様式) が一変する中、着任と研究室の立ち上げにあたり川合所長、メゾスコピック計測研究センター長の岡本先生、人事選考部会長 (当時) の秋山先生、技術推進部の繁政部長と内山主任をはじめとする分子研の皆様、FHI DirectorのMartin Wolf先生をはじめとするFHIの皆様から多大なご協力とご支援をいただいたことに感謝しています。お陰さまでこの研究室紹介を執筆している2021年12月までに明大寺地区の実験棟地下に新しい (素晴らしい) 実験室と装置を立ち上げることができました。私と同じく2021年4月1日付けで着任した西田純助教と始めた私たちのグループは先端的なナノ顕微分光や可視・赤外領域の非線形分光の開発と時空間極限における光と物質の相互作用の解明をテーマとしています。現在は私の専門 (走査プローブ顕微鏡) と西田さんの専門 (超高速赤外分光) とを融合させ、新しい研究をどのように

展開していくかを考え、所内外の人たちと議論を交わす日々を楽しく過ごしているところです。着任のタイミングで研究所からのスタートアップ資金に加え、科研費帰国発展研究とJST創発的研究支援事業に採択していただくことができ、超高速・超広帯域レーザーシステムと走査プローブ顕微鏡とを組み合わせた先端的なナノ分光を実現できる装置を幸先よく導入することができました。これから装置やソフトウェアに工夫を加え、可視から赤外の幅広い波長域において時間分解・多次元・多変数のナノ顕微分光を実装していく予定です。また、分子研の有する放射光施設 (UVSOR) を利用した新しい計測法の開発にも着手しています。やりたいことはたくさんありますが、しばらくは先端計測を基軸とした自分の研究の在り方をよく考え、試行錯誤する時期であると位置づけています。

さて、分子の多様性に起因する自然現象は非常に多岐にわたります。分子に含まれる元素や分子構造をわずかに変えるだけで発現する物性や反応が大きく変わることによって化学の面白さを見出す人も多いのではないのでしょうか。一方で、このような多様性の裏には普遍的な原理が隠されているはずで分

子の生み出す繊細で複雑な現象、そして生体に見られるような美しく統合された分子システムにおける機能発現のメカニズム (謎) を系統的に理解し、演繹的な考え方を与えるのが物理化学です。化学現象の根底には私たちの目には見えない量子力学が支配する電子や原子核の構造と運動があり、私たちが実際に目にする物質の巨視的な性質は統計力学によって微視的な物理法則を基に記述しています。私は化学の原理を物理学的な手法によって追究する物理化学という学問に魅せられ、計測による実験から自分なりの理解を得ようと研究を続けてきました。

これまでにやってきた研究の一つは走査プローブ顕微鏡の先端計測を応用した一分子計測です。分子の構造と動力学 (ダイナミクス) の理解において一分子計測はその根源的な部分を観察します。一分子計測では、例えば、多数の分子をアンサンブル平均 (巨視的な応答) として観測する場合には隠されてしまう微視的な現象をはっきりと見ることができます。溶液中の反応を例にとってみれば、個々の分子は絶えず揺動する溶媒分子によってそれぞれ異なる周辺環境と相互作用しています。そのため反応に寄与する特定の

分子の構造とダイナミクスを詳細に知るためには一分子レベルの計測が必要です。私は最も単純な元素である水素が含まれる化学現象について興味を持ち、特に水素結合の構造とダイナミクスを一分子計測のアプローチによって調べました。水素結合は私たちにとって身近な分子である水や生体機能の根源を司るDNAなどにおいて重要な役割を担っており、「付かず離れず」と形容できる中間的な相互作用の強さが特徴です。また、最も軽い元素である水素を介して形成される水素結合では核の量子効果（トンネル効果やゼロ点振動）とポテンシャルエネルギー面の非調和性とその構造とダイナミクスに影響を及ぼします。これらの繊細かつ複雑な水素結合を走査プローブ顕微鏡によって一分子レベルで直接観察するという研究を博士の学生からポストドクの期間に発展させました。水素のリレー反応や水素の量子ダイナミクスを可視化した実験、一分子を「押して」分子内の水素を動かす実験などが代表的な成果です（参考文献1-4）。これらは自立した研究者になるための基礎を確立する期間に自分なりに考えて行った研究で、これらの成果がGerhard Ertl Young Investigator Awardという表面科学分野の若手研究者に対する国際的な賞の受賞対象になったことはその後のキャリアにおいての自信につながりました（Gerhard Ertlは過去にFHIのDirectorを務められ、2007年のノーベル化学賞を受賞された方です）。

私は2013年4月からFHIでResearch Group Leaderとして研究室を主宰する立場で研究を行っていました。国際的なグループを率いながら新しくはじめたのが走査プローブ顕微鏡とレーザー分光とを組み合わせた極微分光の研究です。ここでの極微は $10^{-9}$  m (ナ

ノメートル)の空間スケールを意味しており、それは物質の構成単位である分子のサイズです。光と物質の相互作用には自然科学において普遍的な重要性があり、そのメカニズムを理解することは物質の成り立ちを解明する分光学、光触媒や光電（エネルギー）変換デバイスなどの技術的な応用に不可欠です。極限的な空間スケールにまで閉じ込めた光と物質（分子）との相互作用を理解し、それを応用した技術へと発展させることを目指した研究を行いました。極微空間に光を閉じ込めて操るプラズモニクスの技術とレーザー光学系を組み込むことのできる走査プローブ顕微鏡とを合わせた先端的な装置を作り上げました。この開発は日本企業（ユニソク）とFHIとの産官連携によって行い、世界に二つとない装置を完成させることができました。この装置によってナノスケールの光と物質の相互作用や超高分解能・超高感度の極微分光などについて成果をあげることができました（参考文献5-8）。主宰者（PI）としての研究をFHIというドイツを代表する研究機関で、そして素晴らしい仲間とともに実施できたことは幸運であったと思います。FHIでの研究がドイツ物理学会の権威あるGaede Prizeの受賞対象となり、現地の学術界から評価していただいたことは誇りに思っています（Wolfgang Gaedeは真空工学の先駆者で近代の表面科学の礎を築いた方です）。加えて、日本表面真空学会の国際的な賞であるHeinrich Rohrer Medalの受賞対象にもなったことも嬉しく思っていま

す（Heinrich Rohrerは走査トンネル顕微鏡の開発者の一人で1986年のノーベル物理学賞を受賞された方です）。また、FHIでの研究期間に北川宏先生（京都大学）が総括を務めていたJSTさきかけの「革新的触媒の科学と創製」に参画することができ、異分野の方々との交流を通して研究に対する考え方を広げることができたと思います。

今後の研究構想ですが、超高速・超広帯域・多次元・多変数極微分光を基軸として高度な物質機能の解明に取り組んでいきたいと考えています。化学現象の根源は電子と原子核の運動、そしてそれらの相互作用にあります。光はこれらの自由度に働きかけることができますが、極限的時空間に閉じ込められた光と物質がどのように相互作用するのかはまだよく理解されていません。そこでは光と物質が混ざり合った量子状態が形成されるかもしれません。先端的なナノ顕微分光によって未開の分野へ挑戦し、物理化学の教科書に新しいページを刻むことのできるような研究を分子研で展開していきたいと考えています。

コロナ禍によって国際的な活動が厳しく制限される中、分子研とFHIは2021年4月より国際研究協力協定を締結しました。物理化学の分野において日独においてそれぞれ中核的な役割を担っている両機関の関係発展を通して、将来の国際的な研究・教育協力にも貢献していくことができればと考えています。

1. *J. Am. Chem. Soc.* **139**, 12681–12687 (2017).
2. *Nature Chemistry* **8**, 935–940 (2016).
3. *Nature Chemistry* **6**, 41–46 (2014).
4. *Nature Materials* **11**, 167–172 (2012).

5. *Nano Lett.* **19**, 5725–5731 (2019).
6. *Nano Lett.* **19**, 3597–3602 (2019).
7. *Nano Lett.* **18**, 152–157 (2018).
8. *Phys. Rev. Lett.* **121**, 226802 (2018).