

6-6 協奏分子システム研究センター

階層分子システム解析研究部門

秋 山 修 志 (教授) (2012 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：生物物理学，時間生物学

A-2) 研究課題：

- a) タンパク質時計が奏でる概日リズムの分子科学的解明
- b) X線溶液散乱による生体分子システムの動的構造解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 時計タンパク質 KaiC は藍藻生物時計の中心振動体であり，ATPase 活性を約 24 時間周期で変動させる。KaiC の原子分解能構造と機能の相関を検証し，わずか 10 ナノメートルという小さな生体分子に，地球の自転周期（約 24 時間）を生み出す構造基盤がデザインされていることを突き止めた。
また，六量体 KaiC の機能発現機構を理解する上で単量体化した KaiC を利用することの重要性が指摘されていたが，ヌクレオチドを除去することで得られる単量体 KaiC が溶液中で非常に不安定であることが問題となっていた。幅広い緩衝液のスクリーニングによりリン酸バッファー中で単量体 KaiC が極めて安定に存在しうることを突き止めた。これにより，KaiC の ATPase 活性および自己リン酸化 / 自己脱リン酸化活性の前定常解析に向けた技術基盤が整備された。
- b) 生体分子システム（時計タンパク質，抗酸化酵素，受容体など）の X 線溶液散乱を記録し，散乱データと結晶構造の比較や低分解能モデルの構築を通して，分子システムの動的構造解析を行った。

B-1) 学術論文

A. MUKAIYAMA, M. OSAKO, T. HIKIMA, T. KONDO and S. AKIYAMA, “A Protocol for Preparing Nucleotide-Free KaiC Monomer,” *Biophysics* **11**, 79–84 (2015).

J. ABE, T. B. HIYAMA, A. MUKAIYAMA, S. SON, T. MORI, S. SAITO, M. OSAKO, J. WOLANIN, E. YAMASHITA, T. KONDO and S. AKIYAMA, “Atomic-Scale Origins of Slowness in the Cyanobacterial Circadian Clock,” *Science* **349**, 312–316 (2015).

B-3) 総説，著書

向山 厚，阿部 淳，孫 世永，秋山修志，「タンパク質の化学反応が細胞内の時を計る」*実験医学* **33**, 3119–3122 (2015).

B-4) 招待講演

秋山修志，「概日時計システム研究における bioSANS への期待と展望」第 3 回 Neutrons in Biology 研究会，日本原子力研究開発機構・原子力科学研究所，東海，March 2015.

S. AKIYAMA, “KaiC as Circadian Pacemaker of Cyanobacterial Circadian Clock,” European Biological Rhythms Society (EBRS)/World Congress of Chronobiology (WCC) meeting, Manchester (U.K.), August 2015.

S. AKIYAMA, “KaiC as Circadian Pacemaker of Cyanobacterial Circadian Clock,” The 53rd Annual Meeting of the Biophysics Society of Japan, Kanazawa University, Kanazawa, September 2015.

秋山修志,「藍藻の時計タンパク質に内包された概日周期と遅さの根源」藍藻の分子生物学2015, かずさアカデミアホール, 木更津, November 2015.

秋山修志,「藍藻生物時計システムに見られる貫階層性」蛋白研セミナー「第6回神経科学と構造生物学の融合研究会」岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, November 2015.

向山 厚,「時計タンパク質 KaiC に書き込まれた生物時計の発振周期」第22回日本時間生物学会学術大会, 東京大学, 東京, November 2015.

B-6) 受賞, 表彰

S. AKIYAMA, The Protein Society Annual Poster Board Award (2002).

S. AKIYAMA, 2006 SAS Young Scientist Prize (2006).

秋山修志, 日本生物物理学会若手奨励賞 (2007).

秋山修志, 平成20年度文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2008).

阿部 淳, 日本生物物理学会中部支部優秀発表賞 (2014).

向山 厚, 日本時間生物学会学術大会優秀ポスター賞 (2015).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会委員 (2011–2014).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2010, 2012, 2015).

日本生物物理学会中部支部長 (2013–2015).

学会の組織委員等

第18回日本時間生物学会学術大会実行委員 (2011).

第12回日本蛋白質科学会年会組織委員 (2012).

第50回日本生物物理学会年会実行委員 (2012).

The Winter School of Sokendai/Asian CORE Program (Jan. 13–16, 2015), Organizer (2015).

X線溶液散乱2015春の学校(May 21–23, 2015) 主催 (2015).

X線溶液散乱2015秋の学校(Oct 5–7, 2015) 主催 (2015).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

SPRING-8 利用研究課題審査委員会 (2011–).

学会誌編集委員

日本生物物理学会「生物物理」会誌編集委員 (2009–2011, 2013–2014).

日本放射光学会「放射光」会誌編集委員 (2013–2015).

日本結晶学会「日本結晶学会」会誌編集委員 (2010–2012).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究,「時間と共に離合集散を繰り返す分子機械のX線小角散乱・動的構造解析」秋山修志 (2005年–2009年).

科研費若手研究(B),「異常分散・X線小角散乱を利用した無配向生体高分子の2原子間距離計測」秋山修志 (2007年–2010年).

科研費若手研究(A),「時を生み出すタンパク質 KaiC における ATPase 自己抑制・温度補償機構」秋山修志 (2010年–2013年).

科研費挑戦的萌芽研究,「多チャンネル・セルを用いたハイスループットX線小角散乱」秋山修志 (2012年–2014年).

科研費若手研究(B),「溶液中における時計タンパク質 KaiC の動態解析」向山厚 (2013年–2014年).

科研費基盤研究(B),「時計タンパク質の固有周波数の分子科学的解明」秋山修志 (2013年–2015年).

科研費挑戦的萌芽研究,「時限機能付き薬剤輸送システムの開発」秋山修志 (2014年–2016年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型)「X線小角散乱と液中高速 AFM の相補利用による分子時計の離合集散計測」秋山修志 (2014年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

研究グループを2012年度に立ち上げ,それ以降,藻類のタンパク質時計システムを題材とした研究に取り組んできた。中核分子(KaiC)の原子分解能構造と概日周期の因果関係を原著論文として発表し,グループ発足時に掲げた将来計画の第一段階を完遂した。2015年度からは第二段階の計画に沿って,温度補償制御の構造基盤の解明,一分子計測,高等生物の時計システム研究に取り組む。

古 賀 信 康 (准教授) (2014 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：生物物理学，タンパク質分子デザイン

A-2) 研究課題：

a) 計算および生化学的アプローチによるタンパク質分子デザイン

A-3) 研究活動の概略と主な成果

望みの機能を持ったタンパク質分子を自在にデザインすることが可能になれば，細胞の制御・設計や医療への貢献，さらには新規酵素やマテリアル開発による産業への応用が期待される。我々は，タンパク質分子を主鎖構造を含めて完全にゼロからデザインすること，加えて自然界のタンパク質分子を大きく改造することにより，望みのタンパク質分子を創製する理論と技術の開発を行った。

- a) $\alpha\beta$ 型タンパク質構造のデザイン。これまでに 2 次構造パターンやループの長さといった局所主鎖構造が 3 次構造トポロジーの決定に重要であることを発見し，それらの関係性を 3 つのルールとして体系化している。本研究では，テトラメイドに自在にタンパク質立体構造をデザインする技術の開発を目指して，タンパク質構造を主鎖二面角パターンとして捉えることによりルールの拡張を行った。拡張したルールを使って様々なトポロジーや形，そして大きさの $\alpha\beta$ タンパク質構造を計算機を用いてデザインし，それらが大腸菌に組み込み発現・精製し，生化学実験によって折り畳み能を調べたところ，デザイン配列は安定な構造を形成していた。さらに，これらの構造を NMR によって解いたところ，計算機上で構築したデザインモデルと主鎖二面角レベルで正確に一致していた。
- b) α ヘリックスからなるタンパク質構造のデザイン。複数の α ヘリックスが集まった構造は極めて多様な構造を生み出し，またその構造は柔軟であり機能発現に重要な役割を果たしている。そこで， α ヘリカルなタンパク質構造を自在にデザインするための手法の開発を行った。まず，自然界のタンパク質構造を解析することにより，ヘリックス同士をつなぐループに典型的なループパターンが存在することを明らかにし，次にこれらループパターンを組み合わせることにより多様なタンパク質主鎖構造のモデリングに成功した。
- c) 動的機能を発現する自然界のタンパク質分子の改造。自然界には，ATP 加水分解のエネルギーを利用して構造変化することにより機能を発現する分子モータータンパク質が存在する。このようなモータータンパク質がどのようにして動的機能を発現しているのか， F_1 -ATPase および V_1 -ATPase を改造することにより，そのメカニズムに迫った。

B-1) 学術論文

Y.-R. LIN, *N. KOGA, R. TATSUMI-KOGA, G. LIU, A. F. CLOUSER, G. T. MONTELLIONE and *D. BAKER, "Control over Overall Shape and Size in De Novo Designed Proteins," *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **112**(40), E5478–5485 (2015).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

N. KOGA, 「創って分かるタンパク質分子の動作原理」, 定量生物の会第 7 回年会, 九州大学, 福岡市, 2015 年 1 月.

N. KOGA, "Protein design from scratch for understanding principles for folding," *Supramolecular Dynamics at the interface of Chemistry and Biology*, アジア連携分子研研究会, 分子科学研究所, 岡崎市, 2015 年 6 月.

N. KOGA,「タンパク質分子デザインの現状と展望」CBI 学会, 東京工業大学キャンパス・イノベーションセンター, 東京, 2015 年 6 月.

N. KOGA,「主鎖二面角パターンを用いたタンパク質立体構造デザイン」第15回日本蛋白質科学会年会, ワークショップ: 天然モノと人工モノ, 両面から迫る最新のタンパク質構造観, あわぎんホール, 徳島市, 2015 年 6 月.

N. KOGA, “Design of ideal protein structures,” The 15th KIAS Conference on Protein Structure and Function, Korea Institute for Advanced Study, Seoul (Korea), 2015 年 9 月.*

N. KOGA, “A synthetic approach to understanding protein molecules,” JST CREST-PRESTO joint international symposium, Structural Biological Dynamics: From Molecules to Life with 60 trillion Cells, The University of Tokyo, Tokyo (Japan), 2015 年 11 月.

N. KOGA, “De novo design of various alpha-beta protein structures,” 理化学研究所横浜キャンパス, 横浜, 2015 年 12 月.

B-6) 受賞, 表彰

古賀信康, 第13回日本蛋白質科学会年会若手奨励賞 (2013).

古賀信康, 第51回日本生物物理学会年会若手奨励賞 (2013).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会平成27年度分野別専門委員: タンパク質設計・ドラッグデザイン (2015).

B-8) 大学での講義, 客員

中央大学理工学部物理学科, 物理学特別講義第三, 2015 年 9 月 4 日.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「基礎生体分子科学」2015 年 11 月 24 日.

総合研究大学院大学物理科学研究科,「構造生体分子科学」2015 年 12 月 1 日.

The Winter School of Sokendai Asian CORE, “Protein design from scratch,” 岡崎カンファレンスセンター(岡崎市), 2015 年 1 月 16 日.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(A),「改造して理解するモータータンパク質 F₁-ATPase の動作原理」古賀信康 (2015 年–2019 年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「細胞機能の制御・設計に向けたアロステリックタンパク質の人工設計」古賀信康 (2014 年–2017 年).

日本学術振興会海外特別研究員,「タンパク質分子構造の理論研究: 構造変化する機能性タンパク質のデザイン」古賀信康 (2007 年–2009 年).

日本学術振興会特別研究員 DC1,「タンパク質機能調節の分子機構の理論研究: 構造の柔らかさとアロステリック効果」古賀信康 (2003 年–2006 年).

C) 研究活動の課題と展望

2014年4月に着任し、計算機および生化学実験両方を用いてタンパク質分子をデザインする研究グループをスタートさせた。望みの機能を持つタンパク質分子を自在にデザインするための手法の確立を目指して、タンパク質分子の構造と機能を完全にゼロからデザインすること、進化の産物である自然界のタンパク質を大きく改造すること、これら2本柱で研究を進める。計算機および生化学実験のための準備は整ってきたので、来年度からは計算機デザインと生化学実験のサイクルをいかに多く回すかが重要となる。

石 崎 章 仁 (特任准教授 (若手独立フェロー))(2012 年 3 月 1 日着任)

A-1) 専門領域: 理論物理化学

A-2) 研究課題:

- a) 凝縮相化学動力学の量子理論
- b) 分子システムの環境適応性の理論

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) シングレットフィッシュンは一つの一重項励起状態から二つの三重項励起状態が生じる過程でありペンタセンなどの有機結晶で観測されており、有機太陽電池の光電変換効率を向上させる新たな指針の一つとして注目されている。数百ピコ秒程度でフィッシュンが起こる分子系が存在する一方、ペンタセンやその誘導体のいくつかでは数百フェムト秒程度で起こることが分光実験によって示されている。多くの研究グループが実験、理論の両面から研究を進めているが、フィッシュンの反応速度を支配する機構の詳細は現状では未解明である。本研究では、電子移動を記述する理論モデルを基にフィッシュンのハミルトニアンを構築し量子ダイナミクス理論に基づいてフィッシュン過程のダイナミクスを計算した。本研究の理論モデルは文献の分光実験で得られた数種類のペンタセン誘導体における反応速度を再現することができた。このモデルに基づき、一重項励起状態と三重項励起状態間のエネルギーギャップ、電荷移動状態のエネルギーの値がどのような条件であるときに超高速のフィッシュンが実現し得るのかを検討し、自由エネルギー曲面の解析によってフィッシュンの反応速度、ダイナミクスにおける電子励起状態のエネルギー依存性について議論した。
- b) 光合成光捕集系における色素の電子励起エネルギー移動を議論する上で、色素分子とタンパク質環境との相互作用によって形成される色素分子の励起エネルギー「地形」は重要な枠割を果たし、電子励起がエネルギー地形の勾配に従って拡散するという描像で議論されてきた。このエネルギー地形は *in vitro* のサンプルを用いた分光実験と X 線結晶構造の情報により決定され、また色素の電子状態の揺らぎとタンパク質の局所的な歪みの間には線形応答論が成り立つことが前提とされてきた。しかし、そのような議論では環境変動に応じた「高い効率で起こるエネルギー移動」と「過剰摂取したエネルギーを熱放出させる制御機構」という一見相反する 2 つの機構の自律的スイッチング・環境応答性を説明できない。本プロジェクトでは光合成エネルギー移動過程の環境応答性を生み出す物理化学機構を明らかにすべく、超高速分光と単一分子分光の実験のグループと共同で色素タンパク質複合体のコンフォメーション変化とその原因、またコンフォメーション変化に伴う色素の再配置・エネルギー地形変化の可能性の検討している。

B-1) 学術論文

- D. M. MONAHAN, L. V. WHALEY-MAYDA, A. ISHIZAKI and G. R. FLEMING**, "Influence of Weak Vibrational-Electronic Couplings on 2D Electronic Spectra and Inter-Site Coherence in Weakly Coupled Photosynthetic Complexes," *J. Chem. Phys.* **143**, 065101 (11 pages) (2015).
- Y. FUJIIHASHI, G. R. FLMIENG and A. ISHIZAKI**, "Impact of Environmentally Induced Fluctuations on Quantum Mechanically Mixed Electronic and Vibrational Pigment States in Photosynthetic Energy Transfer and 2D Electronic Spectra," *J. Chem. Phys.* **142**, 212403 (12 pages) (2015). (Invited)

B-2) 国際会議のプロシーディングス

D. M. MONAHAN, L. V. WHALEY-MAYDA, A. ISHIZAKI and G. R. FLEMING, “Interpreting Oscillations in Numerically Exact Simulations of 2D Electronic Spectra,” *Ultrafast Phenomena XIX*, 553–556 (2015).

B-3) 総説, 著書

石崎章仁, 「新著紹介, K. A. Dill and S. Bromberg, *Molecular Driving Forces; Statistical Thermodynamics in Chemistry, Physics, Biology, and Nanoscience*, Second Edition (Garland Science, London and New York, 2011)」, *日本物理学会誌* **70** (12), p. 946 (2015).

B-4) 招待講演

石崎章仁, 「凝縮相量子ダイナミクスの理論とその光合成初期過程への展開」, 東京大学物性科学研究所, 柏市, 2015年12月.

A. ISHIZAKI, “Impacts of environmentally induced fluctuations on quantum mixtures in energy/charge transfer reactions and 2D electronic spectra,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015 (PACIFICHEM 2015), Honolulu (U.S.A.), December 2015.

A. ISHIZAKI, “Non-Markovian quantum dynamical aspects in photosynthetic light harvesting systems,” CECAM Workshop 2015: Open Quantum Systems Computational Methods, Hong-Kong (China), December 2015.

石崎章仁, 「光合成光捕集系における電子励起エネルギー移動: 光学応答と量子動力学」, 立命館大学, 大津市, 2015年11月.

A. ISHIZAKI, “Title: N/A,” EMN Meeting on Ultrafast Research: Energy Material Nanotechnology, Las Vegas (U.S.A.), November 2015 (スケジュールの不都合により辞退)

石崎章仁, 「実時間量子散逸系の理論とその光合成初期過程への展開」, 第9回物性科学領域横断研究会: 凝縮系科学の最前線, 東京大学, 東京都文京区, 2015年11月.

A. ISHIZAKI, “Influences of quantum mechanically mixed electronic and vibrational pigment states in photosynthetic energy transfer and 2D electronic spectra,” The 1st Mueunjae Symposium on “Chemistry & Light,” Pohang University of Science and Technology, Pohang (Korea), August 2015.

石崎章仁, 「高速レーザー分光と量子動力学理論で探る光合成捕集系の電荷 / エネルギー移動ダイナミクス」, 日本学術振興会 181 委員会研究会「生命革新機能と分子複合技術——生物の驚異的機能は人工的にできるのか?」, 大阪大学, 豊中市, 2015年7月.

A. ISHIZAKI, “Impacts of Environmentally Induced Fluctuations on Quantum Mixing in Energy/Charge Transfer Reactions and 2D Electronic Spectra,” The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC) Satellite Meeting “Recent Advances in Quantum Dynamics and Thermodynamics of Complex Systems,” Peking University, Beijing (China), June 2015.

A. ISHIZAKI, “Impacts of environmentally induced fluctuations on quantum mechanical mixtures in energy/charge transfers and 2D electronic spectra,” The 3rd Workshop on Coherent Energy Transport and Optimization in Photosynthesis, Nanyang Executive Centre, Singapore, May 2015.

A. ISHIZAKI, “The primary steps of photosynthesis explored with laser spectroscopic experiment & quantum dynamic theories,” The Lee Group, Department of Chemistry, Sungkyunkwan University, Suwon (Korea), April 2015.

A. ISHIZAKI, “Impacts of environmentally induced fluctuations on quantum mechanical mixtures in energy/charge transfers and 2D electronic spectra,” The Schlau-Cohen Group, Department of Chemistry, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (U.S.A.), April 2015.

A. ISHIZAKI, “Impact of Environmentally Induced Fluctuations on Quantum Mechanically Mixed Electronic and Vibrational States in Photosynthetic Energy Transfer and 2D Electronic Spectra,” Asian Academic Seminar 2015, Kolkata (India), March 2015.

A. ISHIZAKI, “The Primary Steps of Photosynthesis Explored with Nonlinear Laser Spectroscopic Experiments and Quantum Dynamics Theories,” 名古屋大学リポート分子科学研究所研修“New Research Frontier of Molecular Science; Harmonic Cooperation between Theory and Experiment,” Okazaki (Japan), January 2015.

A. ISHIZAKI, “Quantum Dynamical Aspects in Photosynthetic Energy Transfer,” The Second China-Japan-Korea tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry (CJK-WTCC-II), Kobe (Japan), January 2015.

B-6) 受賞，表彰

石崎章仁, 第10回凝縮系科学賞 (2015).

石崎章仁, 日本物理学会第10回若手奨励賞 (2015).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

45th World Chemistry Congress of the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC-2015) 組織委員・物理化学 (2015).

第3回NINS Colloquium 「自然科学の将来像」運営組織委員 (2014).

NTU-IMS Faculty Exchange Meeting 世話人 (2014).

第22回化学ソルベール会議, scientific secretary (2010).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省科学技術・学術政策研究所科学技術動向研究センター, 専門調査員 (2015).

その他

The Netherlands Foundation for Fundamental Research on Matter, external reviewer (2013,2015).

Research Grant Council of Hong Kong, external reviewer (2012).

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(A), 「光合成光捕獲系における電子エネルギー移動ダイナミクスとその環境適応性の分子理論」石崎章仁 (2013年–2017年).

科研費研究活動スタート支援, 「光合成エネルギー移動ダイナミクスを制御するタンパク質構造の揺らぎと変化について」石崎章仁 (2012年–2013年).

Short-term Fellowship at Wissenschaftskolleg zu Berlin, “Bridging Quanta, Molecules, and Life: Theoretical investigation of responsive and autonomous behaviors of molecular systems,” Akihito Ishizaki (2012–2013).

日本学術振興会海外特別研究員事業,「光合成複合体における超高速エネルギー移動の量子力学的機構の解明」,石崎章仁 (2008年–2010年).

科研費特別研究員奨励費,「超高速非線形分光による凝縮相中分子および分子集合体の量子動力学の理論的解析」,石崎章仁 (2006年–2008年).

C) 研究活動の課題と展望

2008年より開始した光合成エネルギー移動の量子ダイナミクス理論のプロジェクトも収束しつつあり,本年より有機分子結晶におけるシングレットフィッション過程の理論解析など光合成エネルギー移動の理解に基づいた分子デバイス研究へと新たな展開を試みている。また,自然科学として当面の大きな課題は光合成光捕獲系が示す環境応答性というダイナミックで自律的な分子機構を理解することにある。多重の階層を跨ぐかもしれない問題の複雑さと現在の研究グループの小ささを鑑みて,この数年は将来の詳細かつ大規模な研究への展開に備えた理論の枠組み構築に重心を置くことになる。

鹿 野 豊 (特任准教授 (若手独立フェロー))(2012 年 2 月 16 日着任)

A-1) 専門領域: 光物性物理学, 量子光学

A-2) 研究課題:

- a) 固体中の準粒子ダイナミクス
- b) 振動基底状態を用いた量子基礎論
- c) 光信号増幅の技術開発
- d) 操作的観点による物理学理論の再構築および情報理論の発展

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 光と固体の相互作用により, 固体中に起こる光反応の結果として様々な準粒子ダイナミクスを解析することが出来る。電子とホールからなる励起子や固体中の整列した原子の集団振動であるフォノンの量子ダイナミクスを解析する実験系の提案とその解析に着手した。中でも超短パルスを用いたコヒーレント振動状態の生成理論に関して, パルス幅の影響を考慮した理論体系を構築することに成功した。
- b) 原子・分子での振動基底状態の実現はサイドバンド冷却と呼ばれるレーザー冷却技術を用いて実現することが出来る。しかし, 物理系のスケールが大きくなるとサイドバンド冷却限界の上昇により, 振動基底状態の実現が出来なくなる。そこで, 共振器内に物理系を結合させることにより冷却ダイナミクスの変化が起こり, その変化を解析することによりサイドバンド冷却限界を超えた冷却領域が実現する。そのような冷却方法の開発およびマクロ量子系での基礎理論を構築する研究に着手した。
- c) 1 分子光検出などで必須の技術である微弱信号の増幅技術を量子力学の干渉効果をうまく用いることにより明らかにすることが出来た。具体的には, ビームプロファイルをガウスモードではなく非ガウスモードを用いることにより, より大きな効果の信号増幅が出来ることを示した。また, 非ガウスモードの典型例であるラゲールガウスモードを用いた方法論を提示した。
- d) 熱力学と統計力学はどちらもマクロな物理を取り扱う理論であるがその対応関係は明確になっていなかった。そこで, 平衡状態において情報科学的見地を用いて操作論的に統計力学を定義し直し, もともと操作論的に定義されてきた熱力学との対応関係を情報理論的エントロピーを用いて明らかにした。そして, 少数サンプルに対する情報量に関する研究に着手した。

B-1) 学術論文

A. HOSOYA, K. MARUYAMA and Y. SHIKANO, “Operational Derivation of Boltzmann Distribution with Maxwell’s Demon Model,” *Sci. Rep.* **5**, 17011 (9 pages) (2015).

K. G. NAKAMURA, Y. SHIKANO and Y. KAYANUMA, “Influence of Pulse Width and Detuning on Coherent Phonon Generation,” *Phys. Rev. B* **92**, 144304 (7 pages) (2015).

G. DI MOLFETTA, L. HONTER, B. B. LUO, T. WADA and Y. SHIKANO, “Erratum to: Massless Dirac Equation from Fibonacci Discrete-Time Quantum Walk,” *Quantum Stud.: Math. Found.* **2**, 253–254 (2015).

G. DI MOLFETTA, L. HONTER, B. B. LUO, T. WADA and Y. SHIKANO, “Massless Dirac Equation from Fibonacci Discrete-Time Quantum Walk,” *Quantum Stud.: Math. Found.* **2**, 243–252 (2015).

Y. TUREK, H. KOBAYASHI, T. AKUTSU, C. -P. SUN and Y. SHIKANO, “Post-Selected von Neumann Measurement with Hermite–Gaussian and Laguerre–Gaussian Pointer States,” *New J. Phys.* **17**, 083029 (17 pages) (2015).

Y. TUREK, W. MAIMAITI, Y. SHIKANO, C.-P. SUN and M. AL-AMRI, “Advantages of Nonclassical Pointer States in Postselected Weak Measurements,” *Phys. Rev. A* **92**, 022109 (8 pages) (2015).

S. GOTO, “Legendre Submanifolds in Contact Manifolds as Attractors and Geometric Nonequilibrium Thermodynamics,” *J. Math. Phys.* **56**, 073301 (30 pages) (2015).

B-3) 総説，著書

Y. SHIKANO, “These from Bits,” in *It From Bit or Bit From It?* Chapter **10**, 113–118 (2015).

B-4) 招待講演

Y. SHIKANO, “On Lesson from Material Databases,” Pacificchem 2015 symposium on “Machine Learning Meets First-Principles Simulation for Materials Discovery,” Hawaii Convention Center, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

Y. SHIKANO, “Visualizing a quantum state,” International Conference on Quantum Foundations 2015 (ICQF15), National Institute of Technology, Patna (India), December 2015 (VISA申請不備のためキャンセル)

Y. SHIKANO, “Visualizing a quantum state,” 17th SPVM National Physics Conference, Cavite State University, Indang (Philippines), October 2015.

鹿野 豊, 「量子動力学シミュレーション」2015年度日本数学会秋季総合分科会「量子ウォークと関連する話題」(応用数学分科会スペシャルセッション) 京都産業大学, 京都, 2015年9月.

鹿野 豊, 「弱測定による量子現象の可視化」東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究「量子測定の物理と情報通信」第1回研究会, 東北大学電気通信研究所, 仙台, 2015年9月.

Y. SHIKANO, “Lesson from Activities of Gender Equality Promotion by the Physical Society of Japan (JPS),” Association of Asia Pacific Physics Society—Women in Physics Workshop 2015 (AAPPS workshop 2015), Sofitel Ambassador Hotel, Seoul (South Korea), August 2015.

鹿野 豊, 「量子ウォークにおける確率」科学における確率, 統計数理研究所, 立川, 2015年7月.

Y. SHIKANO, “Toward Quantum Phononics—As an example of coherent phonon in diamond—,” The 3rd Awaji International Workshop on Electron Spin Science & Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications (AWEST2015), Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji (Japan), June 2015.

Y. SHIKANO, “Introduction to Discrete-Time Quantum Walk,” Symposium on Computing Science, Mindanao State University, Iligan Institute of Technology (MSU-IIT), Iligan (Philippines), May 2015.

Y. SHIKANO, “Statistical analysis on Complex systems (Lectures),” Tropical School and Workshop on Analytic and Computational Methods for Complex Systems: The Case of Polymer Conformations, Research Center for Theoretical Physics, Central Visayan Institute Foundation, Jagna (Philippines), May 2015.

Y. SHIKANO, “Deformed Statistical Mechanics,” Tropical School and Workshop on Analytic and Computational Methods for Complex Systems: The Case of Polymer Conformations, Research Center for Theoretical Physics, Central Visayan Institute Foundation, Jagna (Philippines), May 2015.

鹿野 豊,「ダイヤモンド窒素格子欠陥中の電子スピンを用いた計測手法」第70回日本物理学会年次大会「スピン分光法の最近の現状と展望」(領域3,領域7,領域5)早稲田大学早稲田キャンパス,東京,2015年3月.

鹿野 豊,“Visualizing Quantum Nature,” Symposium on Quantum Fields in Dynamical Nature, on the occasion of Professor Izumi Ojima’s retirement, 京都大学北部キャンパス北部総合教育研究棟内益川ホール, 京都, 2015年3月.

鹿野 豊,「実験家の協働で見えてきた統計的考え方の重要性と期待」第9回日本統計学会春季集会, 明治大学中野キャンパス, 東京, 2015年3月.

鹿野 豊,「量子計算機の現状と展望」Small-workshop on Communications between Academia and Industry for Security (SCAIS), 九州大学西新プラザ, 福岡, 2015年1月.

B-6) 受賞, 表彰

鹿野 豊, 平成25年度公益財団法人光科学技術研究振興財団研究表彰 (2014).

Y. SHIKANO, 2013 Quantum Information Processing Top Reviewers 受賞 (2014).

Y. SHIKANO, FQXi Essay Contest “It from Bit or Bit from It” Fourth Prize (2013).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

電子情報通信学会量子情報技術時限研究専門委員会委員 (2014–).

日本物理学会男女共同参画推進委員会委員 (2014–).

学会の組織委員等

British Council 主催 Global Innovation Lab. Workshop, パネリスト (2010).

STeLA (Science and Technology Leadership Association) JAPAN Kick off Meeting 総括責任者 (2007).

世界物理年共同主催事業「物理チャレンジ2005」組織委員 (2005).

世界物理年記念春のイベント「物理・ひと・未来」部会員 (2005).

世界物理年春休みイベント「めざせ! 未来のアインシュタイン」運営補助員 (2005).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省科学技術政策研究所科学技術動向研究センター専門調査員 (2014–).

学会誌編集委員

Scientific Reports, Editorial Board Member (2015–).

Advances in Mathematical Physics, Special Issue “The Theory of Quantum Simulation, Quantum Dynamics, and Quantum Walks,” Guest Editor (2014).

Frontier in Mathematical Physics, Review Editor (2013–).

Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, Special Issue “Theoretical and Mathematical Aspects of the Discrete Time Quantum Walk,” Guest Chief-Editor (2013).

Quantum Information Processing, Special Issue on Quantum Walk, Guest Editor (2012).

その他

総合研究大学院大学先導的共同研究企画ワーキンググループ委員 (2015–).

青森県立三本木高等学校出前授業「どうやって安全に通信しようか?」(2015).

橘学苑高等学校進路懇談会 (2014).

早稲田大学本庄高校出前授業「どうやって小さい現象を観るのか?——光で観える限界がある!?——」(2013).

小布施× Summer School by H-LAB 「小布施 WEEKEND カフェ」登壇者 (2013).

岡崎市立城北中学校出前授業「観自然～「もの」を観る様々な方法～」(2013).

World Physics Year Launch Conference “Physics for Tomorrow” 日本代表派遣学生 (2005).

B-8) 大学での講義, 客員

東京工業大学応用セラミック研究所, 客員准教授, 2015年4月–.

チャップマン大学, 客員助教授, 2011年11月–.

B-10) 競争的資金

大幸財団, 「量子動力学シミュレータの原理の理論的探究」, 鹿野 豊 (2014年–2015年).

科研費特別研究員奨励費, 「時間対称化された量子力学における弱値と文脈解釈による真値についての認識論的研究」, 杉尾 一 (2013年–2015年).

科研費若手研究(B), 「微小共振器ポラリトン凝縮体生成過程の量子ダイナミクスの解析」, 鹿野 豊 (2013年–2015年).

日本学術振興会優秀若手研究者海外派遣事業, 「時間とエネルギーに対する量子測定モデルの確立」, 鹿野 豊 (2009年–2011年).

科研費特別研究員奨励費, 「時間とエネルギーに対する量子測定モデルの確立」, 鹿野 豊 (2009年–2012年).

C) 研究活動の課題と展望

分子科学研究所着任以前までに研究を行ってきた量子情報科学の一分野である量子測定理論や量子基礎論ではイメージング科学との融合により研究テーマとして発展した部分はある。しかし, 分子科学研究所着任以後に始めた振動状態に関する研究テーマに関しては結果が出始めているものの, 本格的な軌道にのせることは大変厳しい状況である。特に, 日常的に議論を行うために所内において理論と実験の協奏的關係を構築し, 分子科学研究所の基礎である振動状態分光に関する知見を取り込む必要性がある。また, 研究グループとしての研究環境を向上するためにグループメンバーを増やすことに努めインターンシップの学生などを確保してきたが, 数ヶ月単位の滞在では新しい研究テーマを展開するには短すぎる期間である。現在の研究グループの状況を踏まえ, グループリーダー鹿野の残された在任期間の中で恒常的な研究活動を維持・発展するための制度的・構造的欠陥を克服する戦略と実行力が現在の課題である。

小 林 玄 器 (特任准教授 (若手独立フェロー))(2013 年 9 月 1 日着任)

A-1) 専門領域: 無機固体化学, 固体イオニクス, 電気化学, 蓄電・発電デバイス

A-2) 研究課題:

- a) H^- 導電性酸水素化物の物質探索
- b) H^- のイオン導電現象を利用した新規イオニクスデバイスの創成
- c) 電極 / 電解質界面制御によるリチウム二次電池の高性能化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 当グループがこれまでおこなってきた H^- 導電体 $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1+x+y}\text{O}_{3-y}$ の研究から得られた知見を基に物質探索を進め, 新たに $\text{Ba}_2\text{LiH}_{3-2x}\text{O}_{1+x}$ と Ba_2ScHO_3 の合成に成功した。 $\text{Ba}_2\text{LiH}_{3-2x}\text{O}_{1+x}$ は, $300\text{ }^\circ\text{C}$ で $10^{-2}\text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ を越える極めて高い H^- 導電特性を示した。一方, Ba_2ScHO_3 は, これまで報告された酸水素化物とは異なる H^- の配位環境をとることが分かり, 今後の酸水素化物の物質設計に資する固体化学的に有益な知見を得た。
- b) $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1+x+y}\text{O}_{3-y}$ が全固体電池の固体電解質として利用できることを明らかにした。また, 水素透過性の Pd を電極に用いた固体電池の電気化学測定から $\text{H}_2 + 2\text{e}^- \rightarrow 2\text{H}^-$ の反応が Pd 電極で可逆的に進行することを確認した。
- c) リチウム二次電池の高容量正極材料として期待されている $\text{Li}_{1.2}\text{MO}_2$ ($M = \text{Ni}, \text{Co}, \text{Mn}$) の粒子表面を Al_2O_3 で修飾することで電池特性の向上に成功した。また, Al_2O_3 修飾を施した $\text{Li}_{1.2}\text{MO}_2$ の粒子の最表面からバルク内部にかけての電子状態を硬 X 線光電子分光測定により明らかにした。

B-1) 学術論文

S. TSUSHIMA, W. HUNG, P. DEEVANHXAY G. KOBAYASHI, R. KANNO and S. HIRAI*, "In Situ X-Ray Visualization of the Lithiation Process in a Porous Graphite Electrode in an Operating Li-Ion Cell," *ChemElectroChem* **2**, 1535–1540 (2015).
R. SAKUMA, H. HASHIMOTO, G. KOBAYASHI, T. FUJII, M. NAKANISHI, R. KANNO, M. TAKANO and J. TAKADA*, "High-Rate Performance of Bacterial Iron-Oxide Electrode Material for Lithium-Ion Battery," *Mater. Lett.* **139**, 414–417 (2015).

B-4) 招待講演

G. KOBAYASHI, "Hydride Conduction in Oxyhydrides," 20th International Conference on Solid State Ionics, Keystone (U.S.A.), June 2015.

B-5) 特許出願

特願 2015-228680, 「ヒドリドイオン導電体およびその製造方法」小林玄器, 渡邊明尋, 菅野了次, 平山雅章(自然科学研究機構, 東京工業大学) 2015 年.

B-6) 受賞, 表彰

G. KOBAYASHI, International Conference on Materials for Advanced Technologies 2009, Best Poster Award (2009).

G. KOBAYASHI, The American Ceramics Society Spriggs Phase Equilibria Award (2010).

小林玄器, 手島精一記念研究賞(博士論文賞)(2011).

橋本英樹, 小林玄器, 鈴木智子, 第三回ネイチャー・インダストリー・アワード特別賞 (2014).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

2013年電気化学秋季大会実行委員 (2013).

第56回電池討論会実行委員 (2015).

B-8) 大学での講義, 客員

東京理科大学理学部, 集中講義「特別研究」2015年10月3日.

B-10) 競争的資金

科研費研究活動スタート支援, 「逆ペロブスカイト型新規リチウムイオン導電体の創成」小林玄器 (2011年–2012年).

科研費若手研究(B), 「ヒドリド含有酸化物を基軸とした新規機能性材料の探索」小林玄器 (2012年–2014年).

科学技術振興機構さきがけ研究「新物質科学と元素戦略」, 「ヒドリド酸化物の直接合成による新規機能性材料の探索」小林玄器 (2012年–2016年).

科研費若手研究(A), 「新規イオニクスデバイスの開発に向けたヒドリド導電性物質の探索」小林玄器 (2015年–2018年).

C) 研究活動の課題と展望

H⁻ 導電性酸水素化物の物質探索および新規イオニクスデバイスの創製(研究課題 a), b))

着任時から一貫して取り組んできたH⁻ 導電性酸水素化物の物質探索については, Ba₂LiH_{3-2x}O_{1+x} の合成に成功したことで大きく進展した。Ba₂LiH_{3-2x}O_{1+x} が 300–400 °C で示すH⁻ 導電特性($\sigma \geq 10^{-2} \text{ S cm}^{-1}$)は, プロトン(H⁺)による従来の水素のイオン輸送では達成できなかった特性である。プロトン(H⁺)による水素のイオン伝導では, 水または酸化物イオンとの結合を介してH⁺ が伝導するため, 水を固体内に結晶水として留めることができない, またはH–O 結合の束縛が強いなどの理由から, 中温域(200–400 °C)で優れた導電特性が得られない。これに対し, H⁻ は固体内を単独でホッピング伝導できるため, この温度域で高い導電率が得られた可能性がある。今後は, これまで得られた知見を基に, 更なる導電率の向上を目指して物質探索を継続する。また, 物質探索と並行してH⁻ のイオン導電機構や拡散係数などを明らかにし, 組成・構造・物性の関連性をより詳細に解明することで, H⁻ 導電体の研究を固体イオニクスの新たな研究分野として確立・体系化したい。

H⁻ のイオン導電現象の電池反応への応用に関しては, 実際に, 合成した酸水素化物を固体電解質に用いた固体電池を作製し, H₂ ガスを活物質としたH⁻/H₂ の酸化還元反応を観測した。今後は, 新しい発電・蓄電デバイスの創成を目的として, 正極側の反応を検討したい。また, これまで合成した酸水素化物の熱的・電氣的安定性を調べ, 電池材料としての可能性を多角的に検証する。

電極 / 電解質界面の制御(研究課題 c)

リチウム二次電池電極の表面を異種酸化物やリン酸塩などで修飾し、電池特性の飛躍的向上に繋がる界面制御技術の確立を目指す。さらに、表面修飾が電極 / 電解質界面における電荷移動やイオン拡散に与える影響を明らかにする。表面修飾が電池反応に与える影響を明らかにするためには、電池反応前後の電極や電解質の電子状態や結晶構造の変化を調べる必要があり、UVSOR, SPring-8 などの放射光施設や J-Parc などの中性子施設を利用する予定である。電極 / 電解質界面でのイオン拡散現象に関する研究によって得られた知見は、研究課題 b) の新規イオニクスデバイスの創成にフィードバックする。

機能分子システム創成研究部門

山 本 浩 史 (教授) (2012 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：分子物性科学

A-2) 研究課題：

- a) 有機モットFET (FET = 電界効果トランジスタ)
- b) 有機超伝導FET
- c) 超分子ナノワイヤー

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機モット絶縁体 κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]X (X = Cl, Br) の薄膜単結晶を用いたFETを作製し、その電気的特性を測定した。モット絶縁体中では電子間に働くクーロン反発と格子整合のために本来金属的であるべきキャリアの伝導性が極端に低い状態が実現しているが、トランジスタのゲート電界により静電キャリアドーピングが行われると実効的なクーロン反発が遮蔽されて金属的な伝導性が復活する。こうした原理による伝導性スイッチングはこれまでの半導体デバイスではほとんど使われてこなかったが、我々のグループが世界に先駆けて原理検証したものである。本年はより高密度のキャリア注入を実現するため、イオン液体を用いた電気化学的ドーピングを試みることにより、EDL (Electric Double Layer Transistor) としての両極性動作を確認することが出来た。EDLTを用いると、これまで困難であったp型領域でのホール効果測定が可能となり、その結果有機モット絶縁体において初めてフェルミアーク由来と思われる輸送現象を観測することに成功した。
- b) 上記モット絶縁体のモットハバードギャップを歪みや静電キャリアドーピングで小さくしていくと、低温において超伝導状態が実現することが予想されている。そこで基板からの歪みを制御することによって極限まで電荷ギャップを小さくしたFETを作製し、これにゲート電圧を印加することによって、有機トランジスタにおける世界初の電界誘起超伝導を実現した。具体的には、基板としてひっぱり歪み効果の小さいNb-doped SrTiO₃を選択し、その表面にAl₂O₃をALD (Atomic Layer Deposition) 成長させることによってボトムゲート用の基板を作製した。この基板に κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Brの薄膜単結晶を載せて低温まで温度を下げると、電子相がちょうど超伝導とモット絶縁体の境界付近に誘導され、非常に小さな摂動で超伝導転移を制御できる。このような超伝導トランジスタに、光によってダイポールのスイッチングが出来る単分子誘電膜を組み合わせると、紫外光と可視光で超伝導状態をON / OFFすることが可能となった。本年はこうした光制御型超伝導トランジスタのn型領域への拡張を行った。
- c) 我々は以前の研究において、分子性導体の結晶中にハロゲン結合を利用した超分子ネットワーク構造を構築し、絶縁性の被覆構造とその中を貫通する伝導性ナノワイヤーとからなる複合構造を形成した。こうしたナノワイヤーは結晶構造の中で三次元的に周期配列しているため、結晶の並進対称性を使った配線材料として利用できる可能性がある。そのため、現在このようなナノワイヤーの物性と配列様式を改良するための研究を行っている。

B-1) 学術論文

Z. QIU, M. URUICHI, D. HOU, K. UCHIDA, H. M. YAMAMOTO and E. SAITOH, “Spin-Current Injection and Detection in κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Br,” *AIP Adv.* **5**, 057167 (7 pages) (2015).

M. SUDA, R. KATO and H. M. YAMAMOTO, “Light-Induced Superconductivity Using a Photo-Active Electric Double Layer,” *Science* **347**, 743–746 (2015).

B-3) 総説, 著書

山本浩史, 須田理行, 「光でオン・オフ可能な超伝導スイッチの開発」*自動車技術* **69(9)**, 114–115 (2015).

山本浩史, 「電界誘起相転移」*分子性物質の物理*, 朝倉書店, 第5章, 103–125 ページ (2015).

山本浩史, 須田理行, 「物理科学, この1年: 世界初の有機超伝導トランジスター」*パリティ* **30**, 23–25 (2015).

J. MANNHART, H. HILGENKAMP and H. M. YAMAMOTO, “Thee-Terminal Device,” in *Reference Module in Materials Science and Materials Engineering*, Saleem Hashmi, Ed. (2015).

B-4) 招待講演

H. M. YAMAMOTO, “Switching of organic superconductivity by electric-field, strain, and light,” Pacificchem2015, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

H. M. YAMAMOTO, “Sheathed Nanowires Aligned by Crystallographic Periodicity,” 3CG, Hong Kong (China), December 2015.

H. M. YAMAMOTO, “Field-/Light-induced Phase Transitions in organic FET interfaces,” WPOO3-2015, Okazaki (Japan), December 2015.

H. M. YAMAMOTO, “Phase-transition Transistors Based on Organic Materials,” Molecular Designs for Advanced Materials: Workshop and Conference, Chiang Mai (Thailand), November 2015.

H. M. YAMAMOTO, “Photo-Induced Superconductivity Observed at Organic Field-Effect-Transistor Interface,” ISS2015, Tokyo (Japan), November 2015.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Phase-Transition Transistors with Strongly-Correlated Electrons,” ISCOM2015, Munich (Germany), September 2015.

H. M. YAMAMOTO, “Thin-Film Single Crystals for Organic Superconducting Transistor,” ICCOSS2015, Niigata (Japan), June 2015.

H. M. YAMAMOTO, “Field-induced superconductivity in an organic FET,” EM-NANO2015, Niigata (Japan), June 2015.

H. M. YAMAMOTO, “Light-induced superconductivity using photo-active electric double layer,” Asian Academic Seminar 2015, Kolkata (India), March 2015.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistors with Light-Tunable Superconducting Channel,” PACCON2015, Bangkok (Thailand), January 2015.

H. M. YAMAMOTO, “Switching of organic superconductivity by electric-field, strain, and light,” AIMR seminar, Sendai (Japan), November 2015.

山本浩史, 「強相関有機デバイスを用いた物性物理とエレクトロニクス」*応物教室談話会*, 名古屋大学, 名古屋, 2015年10月.

H. M. YAMAMOTO, “Field-, Strain-, and Light-induced Superconductivity in Organic FETs,” Seminar in Max Plank Institute Stuttgart, Stuttgart (Germany), September 2015.

山本浩史,「有機相転移トランジスタと強相関物性物理」物性夏の学校, 岐阜, 2015年 7月.

山本浩史,「光で超伝導を操る分子システムの開発」分子システム研究会, 2015年 5月.

山本浩史,「有機 Mott 絶縁体の FET 構造による電子相制御」物理学会, 早稲田大学, 東京, 2015年 3月.

山本浩史,「強相関電子材料を用いた有機エレクトロニクス」九大 OPERA セミナー, 福岡, 2015年 2月.

山本浩史,「有機強相関トランジスタによる物性科学」東北大学理学部物理学科コロキウム, 仙台, 2015年 1月.

B-6) 受賞, 表彰

山本浩史, CrystEngComm Prize (2009).

山本浩史, 分子科学会奨励賞 (2009).

山本浩史, 理研研究奨励賞 (2010).

須田理行, 分子科学討論会優秀講演賞 (2013).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会東海支部常任幹事 (2015-).

日本化学会プログラム編集委員幹事 (2013).

日本化学会物理化学ディビジョン幹事 (2014-).

分子科学会企画委員 (2012-).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会情報科学用有機材料第 142 委員会運営委員 (2007-).

日本学術振興会情報科学用有機材料第 142 委員会 B 部会主査 (2014-).

学会の組織委員等

アジア科学セミナー組織委員 (2014-2015).

総研大アジア冬の学校実行委員 (2015).

学会誌編集委員

Molecular Science 編集委員 (2010-2011).

その他

理化学研究所研究員会議代表幹事 (2009-2010).

B-8) 大学での講義, 客員

名古屋大学大学院工学研究科,「応用物理量子物性」2015年 10月.

東京工業大学大学院総合理工学研究科,「半導体電子物性」2015年 10月-2016年 2月.

東京工業大学大学院総合理工学研究科, 連携教授, 2012年 6月-.

東北大学大学院理学系研究科,「強相関電子物理学特論」2015年 11月.

東北大学大学院理学系研究科, 委嘱教授, 2015年 4月-.

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域研究(公募研究)「 π 電子系強相関物質を用いた歪み制御型相転移デバイスの開発」須田理行(2015年–2017年).

科研費若手研究(B)「有機単分子膜モットFETの開発」須田理行(2013年–2015年).

科学技術振興機構さきがけ研究「電子相関を利用した新原理有機デバイスの開発」山本浩史(2009年–2013年).

科研費若手研究(A)「超分子ナノワイヤーの冗長性拡張による金属化」山本浩史(2008年–2011年).

科研費特定領域研究(公募研究)「電極との直接反応によるDCNQIナノ単結晶作成とその機能探索」山本浩史(2006年–2008年).

理研理事長ファンド戦略型「シリコン基板上での分子性導体ナノ結晶作成とその物性測定」山本浩史(2005年–2007年).

理研研究奨励ファンド「Crystal Engineeringを用いた導電性ナノワイヤーの多芯化・直交化」山本浩史(2003年–2004年).

C) 研究活動の課題と展望

分子系ならではの格子の柔らかさと電子間の相互作用をうまく生かして創発的物性探索を展開する。具体的には、これまで開発してきた低温での超伝導転移や室温付近でのモット転移を用いたデバイスに対して、単分子薄膜技術や光応答性双極子を組み合わせることによって、新しい電子素子・分子素子の作製と関連するサイエンスの創出を試みる。

村 橋 哲 郎 (教授) (2012 年 4 月 1 日 ~ 2015 年 3 月 31 日)^{*}

A-1) 専門領域：錯体化学，有機金属化学

A-2) 研究課題：

- a) 一次元金属鎖サンドイッチ錯体の創成と性状解明
- b) 二次元金属シートサンドイッチ錯体の創成と性状解明
- c) 高反応性パラジウム錯体およびパラジウムクラスターの反応性解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 一次元金属鎖サンドイッチ錯体のオリゴマーサイズへの展開：オリゴマーサイズのサンドイッチ構造の構築を達成。
- b) 二次元金属シートサンドイッチ錯体の創成展開：パラジウムシート配位サイトにおけるベンゼンおよびナフタレンの安定バインド様式を解明。
- c) パラジウムクラスターの不飽和基質バインド様式と原理を解明：ヘテロ芳香族化合物に対する二核配位様式を解明。

B-1) 学術論文

K. YAMAMOTO, M. TERAMOTO, K. USUI and T. MURAHASHI, “Anti Dinuclear Adducts of Cycloheptatriene and Cycloheptatrienyl Ligands: Anti-[Pd₂(μ-C₇H₈)(PPh₃)₄][BF₄]₂ and anti-[M₂(μ-C₇H₇)(PPh₃)₄][BF₄] (M = Pd, Pt),” *J. Organomet. Chem.* **784**, 97–102 (2015).

Y. ISHIKAWA, S. KIMURA, K. YAMAMOTO, Y. KURASHIGE, T. YANAI and T. MURAHASHI, “Modulation of Benzene or Naphthalene Binding to Palladium Cluster Sites by the Backside-Ligand Effect,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **54**, 2482–2486 (2015).

S. HORIUCHI, Y. TACHIBANA, M. YAMASHITA, K. YAMAMOTO, K. MASAI, K. TAKASE, T. MATSUTANI, S. KAWAMATA, Y. KURASHIGE, T. YANAI and T. MURAHASHI, “Multinuclear Metal-Binding Ability of a Carotene,” *Nat. Commun.* **6**, 6742 (2015).

K. YAMAMOTO, Y. ISHIKAWA, S. KIMURA, K. TAKASE and T. MURAHASHI, “Dinuclear Palladium(I) Sandwich Complexes of Furan and Toluene,” *C. R. Chim.* **18**, 785–789 (2015).

B-4) 招待講演

T. MURAHASHI, “Chemistry of Multinuclear Sandwich Complexes,” Pure and Applied Chemistry International Conference 2015 (PACCON 2015), Bangkok (Thailand), January 2015.

T. MURAHASHI, “Metal Assembly in Organometallic Sandwich Frameworks,” 10th China-Japan Joint Symposium on Metal Cluster Compounds, Fuzhou (China), October 2015.

T. MURAHASHI, “Multinuclear Sandwich Complexes Containing Extended π-Conjugated Hydrocarbon Ligands,” PACIFICHEM 2015, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

B-6) 受賞, 表彰

村橋哲郎, 日本化学会進歩賞 (2007).

村橋哲郎, 錯体化学会研究奨励賞 (2007).

村橋哲郎, 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2008).

村橋哲郎, 有機合成化学協会研究企画賞 (2008).

村橋哲郎, Royal Society of Chemistry (RSC), Dalton Lectureship Award (2010).

村橋哲郎, JST - さきがけ The Chemical Conversion of Light Energy Prize (2014).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会東海支部常任幹事 (2012–2014).

錯体化学会副事務局長 (2012–2015).

錯体化学会理事 (2012–2014).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省学術審議会専門委員会科研費審査委員 (2009–2010, 2012–2013).

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究(公募研究)「 π -電子空間における金属原子集合体の形成と構造制御」村橋哲郎 (2005年).

科研費若手研究(B)「シート状2次元パラジウム骨格を持つ有機パラジウム錯体の創製」村橋哲郎 (2005年–2006年).

大阪大学 FRC 若手研究者育成プログラム「サンドイッチ型二次元単層金属シート化合物の創出」村橋哲郎 (2005年).

科学技術振興機構さきがけ研究「炭素鋳型法による低次元性ナノ金属集合体のビルドアップ型創製」村橋哲郎 (2005年–2009年).

科研費特定領域研究(計画研究)「遷移金属多核錯体の高精度金属核配列制御」村橋哲郎 (2006年–2009年).

科研費若手研究(B)「メタロセン型パラジウムクラスター分子の創製および反応性」村橋哲郎 (2007年–2008年).

住友財団基礎科学助成「拡張 π -共役炭素間に固定された多核金属種の動的集合性及び反応性の解明」村橋哲郎 (2009年–2010年).

科学技術振興機構さきがけ研究「光化学的手法による天然有機色素の金属バインディング機能創出」村橋哲郎 (2010年–2013年).

科研費挑戦的萌芽研究「メタロセン型異種混合金属クラスターの創製」村橋哲郎 (2011年–2012年).

徳山科学技術振興財団研究助成「メタロセン型後周期遷移金属クラスター触媒の開発」村橋哲郎 (2012年–2013年).

科研費若手研究(A)「後周期遷移金属を用いたメタロセノイドクラスターの創製と反応解明」村橋哲郎 (2012年–2014年).

科研費新学術領域研究(計画研究)「柔らかな連続多点配位性を持つ有機多核金属複合体の創成」村橋哲郎 (2013年–2017年).

科研費挑戦的萌芽研究「酸化-増核シーケンスに基づく一次元金属鎖分子の構築」村橋哲郎 (2013年–2014年).

科研費基盤研究(B)「サンドイッチ構造を基盤とする金属シートクラスターの創成」村橋哲郎 (2015年–2017年).

科研費挑戦的萌芽研究「バイメタリック金属クラスターの一原子金属配列制御と金属交換」村橋哲郎 (2015年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

我々の研究グループでは、新有機金属化合物群の実証・創成研究、および反応活性遷移金属錯体の反応機構の解明を主体とする研究を進めている。については、独自の分子設計指針に基づいて研究を展開しており、特に新しいサンドイッチ化合物群の創出に力を入れている。2つの不飽和炭化水素類がその π -電子を用いて金属に配位することにより生じるサンドイッチ錯体は、代表的な有機金属化合物群の一種であるが、従来の概念では、安定サンドイッチ分子の構造内に固定できる金属原子の数は1つまたは2つに制限されと考えられてきた。これに対して、我々の研究グループでは、新しい錯体合成法を開発し、多数の金属原子からなる金属集合体がサンドイッチ分子内に形成・固定され、安定な分子を与えることを初めて発見している(*Science* 2006, *Nat. Commun.* 2015 など)。この発見を契機として、様々なサイズ・形状を持つ多核サンドイッチ化合物が得られることを明らかにしてきており、多核サンドイッチ化合物は広く存在しうる一般性の高い新分子群であることが判明しつつある。2015年度にオリゴマーサイズの構築にも成功しており、今後も合成研究をさらに展開していくことにより、多核サンドイッチ化合物の一般性を確立できる可能性がある。また、適用できる金属元素の種類を増やす検討も必要である。一方、多様な種類の多核サンドイッチ化合物が入手できるようになってきたため、多核サンドイッチ化合物の基本的物性や反応性の解明にも着手できるようになってきた。既に、いくつかの興味深い化学的性質を明らかにしており、興味深い動的構造変化、光応答性、レドックス応答性等を明らかにしている(*Nat. Chem.* 2012 など)。引き続きその全貌を明らかにしていく。また、については、均一系で取り扱うことのできる反応活性Pd-Pd結合錯体を合成することに成功しており、その反応機構についての研究を進めている。特に、ここ数年は、アレーン類やヘテロアレーン類とパラジウムクラスターとの配位結合様式および変換パターンの解明を進めている。パラジウムとアレーン類との結合相互作用は弱いため、これまでその配位結合様式は詳しく理解されていなかったが、これを初めて詳細に解明することに成功している。アレーン類の二核付加反応や三核シートおよび四核シート上でのアレーンバインド様式等を明らかにしている(*J. Am. Chem. Soc.* 2011, *Angew. Chem.* 2015 など)。

*) 2015 年 4 月 1 日東京工業大学大学院理工学研究科教授

鈴木 敏 泰 (准教授) (1998 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

- a) 曲面グラフェン分子の開発 (芳香族ベルト・サドル)
- b) 電界効果トランジスタのための有機半導体の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) フラーレン類やカーボンナノチューブの芳香族性は未だよく理解されておらず、理論家の間でも議論の対象となっている。実験的には、NMR の遮蔽効果が環電流の合計としての情報を与える。 C_{60} の場合、He や Xe 原子、水素や水分子を中心に置いた内包フラーレンが知られており、それらの NMR が溶液中で測定されている。例えば、 $H_2@C_{60}$ の 1H NMR では、 -1.44 ppm にシングレットが観測されているが、これは溶液中の水素分子と比較して 5.98 ppm も高磁場シフトしている。 $[n]$ シクロパラフェニレン (CPP) はナノフープと呼ばれ、アームチェア型カーボンナノチューブの最小モデルであり、 C_{60} には $[5]$ CPP の構造が含まれている。CPP の環中心における遮蔽効果は、CPP の芳香族性を判断するよい指標となりうる。フラーレンと異なり、CPP 環内に原子や小さな分子をとどめておくことは困難である。そのため、環中心近くに共有結合によってつながれたグループをもつ誘導体を設計する必要がある。この目的のために、 $[8]$ CPP の誘導体である 3 種のテトラシクロ (2,7-カルバゾール) 合成した。一つの化合物は、隣り合ったアンチ型カルバゾールの間に 5,5-ジメチルノナンが架橋されており、共有結合によりつながれたメタンブローブとして利用することができる。環中心近くに固定されたメチル基は、ローカル環電流によって強く遮蔽されており、 1H NMR で -2.70 ppm にシングレットを示した。次に DFT の NMR 計算によって得られた nucleus-independent chemical shift (NICS) 値を用い、ローカル環電流とナノフープ全体を巡るグローバル環電流をそれぞれ可視化した。ローカル環電流によりナノフープ環内は完全にジアトロピックとなり、パラトロピック領域は環外のみ存在する。また、 $[5]$ CPP から $[7]$ CPP ではパラトロピックのグローバル環電流が生じ、 $[8]$ CPP 以上ではほとんど発生しないことが分かった (論文投稿中)。

B-1) 学術論文

F. ANGER, H. GLOWATZKI, A. FRANCO-CAÑELLAS, C. BÜRKER, A. GERLACH, R. SCHOLZ, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI, N. KOCH and F. SCHREIBER, "Interface Dipole and Growth Mode of Partially and Fully Fluorinated Rubrene on Au(111) and Ag(111)," *J. Phys. Chem. C* **119**, 6769–6776 (2015).

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(B),「チューブ状多環芳香族炭化水素の合成」阪元洋一 (2006 年–2007 年).

C) 研究活動の課題と展望

京大化研・山子教授を代表者とするCREST「超分子化学的アプローチによる環状 π 共役分子の創製とその機能」に共同研究者として参加している(2016年3月まで)有機ELや有機トランジスタの材料開発における経験を生かしていきたい。これまで、有機デバイスに使われている π 共役分子は直鎖型のものである。これが環化することによって、どのような固体構造を取るのか興味深い。アモルファスになるのか、結晶になるのか、それとも分子構造により自由に制御できるのか、その点を見極めていきたい。我々はここ数年、短いカーボンナノチューブである芳香族ベルトの有機合成に取り組んでいる。これは、今回のCRESTのテーマとも合致するので、今後ともその完成を目指していきたいと思う。