

6. 研究領域の現状

6-1 論文発表状況

分子研では毎年 Annual Review（英文）を発刊し、これに発表した全ての学術論文のリストを記載している。

論文の発表状況

編集対象期間	ANNUAL REVIEW	原著論文の数	総説等の数
1996.9. ～ 1997.8.	1997	403	41
1997.9. ～ 1998.8.	1998	402	44
1998.9. ～ 1999.8.	1999	401	47
1999.9. ～ 2000.8.	2000	337	30
2000.9. ～ 2001.8.	2001	405	65
2001.9. ～ 2002.8.	2002	489	59
2002.9. ～ 2003.8.	2003	530	45
2003.9. ～ 2004.8.	2004	435	40
2004.9. ～ 2005.8.	2005	402	44
2005.9. ～ 2006.8.	2006	340	21
2006.9. ～ 2007.8.	2007	267	44
2007.9. ～ 2008.8.	2008	214	30
2008.9. ～ 2009.8.	2009	265	67
2009.9. ～ 2010.8.	2010	263	56
2010.9. ～ 2011.8.	2011	252	31
2011.9. ～ 2012.8.	2012	266	59
2012.9. ～ 2013.8.	2013	280	52
2013.9. ～ 2014.8.	2014	171	38
2014.9. ～ 2015.8.	2015	193	40
2015.9. ～ 2016.8.	2016	207	29

6-2 理論・計算分子科学研究領域

理論分子科学第一研究部門

齊 藤 真 司（教授）（2005 年 10 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：物理化学，理論化学

A-2) 研究課題：

- a) 生体分子の構造変化動力学に関する理論研究
- b) 時計タンパク質 KaiC の概日リズム機構に関する理論研究
- c) ポリセオナミド B のイオン透過機構に関する一分子反応機構の理論研究
- d) 光合成細菌における励起エネルギー移動に関する理論研究
- e) 水の特異性の起源，ガラス転移・Kauzmann 温度に関する理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 近年，超高速分子動力学シミュレーション専用機 ANTON により，ミリ秒スケールのトラジェクトリの計算が可能になった。そこで，運動の時間スケールの違いにより構造変化の基底を構築する方法を提案し，抽出された遅い（幾つかの）運動を反応座標として構造変化の自由エネルギー面および構造変化動力学の解析を行った。その結果，比較的小さなタンパク質であっても，多様な構造変化経路や天然状態には存在しない結合の生成により構造変化が非常に幅広い時間スケールをもつ不均一なダイナミクスを示すことを明らかにした。
- b) シアノバクテリアの概日リズムは3つのタンパク質により制御されており，その中でも，とくに時計タンパク質 KaiC が重要であることが知られている。さらに，最近の秋山らの実験により，KaiC の ATP 加水分解はモノマーあたり 1 日に約 11 個しか ATP を分解しない極めて遅い反応にも関わらず，概日リズムの周期と強い相関があることが明らかにされた。そこで，KaiC の ATP 加水分解反応機構からシステムとしての概日リズムの発現機構に至る幅広い時間・空間スケールの解析を進めている。
- c) ポリセオナミド B (pTB) は非タンパク質構成アミノ酸を含む 48 アミノ酸残基から構成され，D- および L- アミノ酸が交互に配列し， β -ヘリックス構造をとるペプチドである。この pTB は，自発的に脂質二重膜に侵入しチャネルを形成することにより，イオンチャネルの機能を発現することが老木らにより最近明らかにされた。pTB におけるイオン透過機構の解明に向け，pTB に対するポテンシャルパラメータを新たに決定し，膜侵入の自由エネルギー・動的過程，膜内での pTB の構造およびその揺らぎ等の解析を進めている。
- d) 光合成系では，発色団で吸収された光エネルギーが励起エネルギー移動により効率よく活性中心へと伝達される。しかし，高効率エネルギー移動がどのように達成されているのかについては未だに明らかにされていない。我々は，Fenna-Matthews-Olson (FMO) タンパク質を例として，各色素のエネルギー準位およびその揺らぎを解明するための方法論の開発を進めてきた。その結果，FMO タンパク中の色素のエネルギー準位を第一原理的に求めることに成功し，各色素の構造やタンパク質や水など色素周辺の環境により励起エネルギーが如何に揺らいでいるのかを明らかにした。
- e) 水は常温付近で様々な特異的な熱力学性質を示すが，温度低下とくに融点以下でその特異性はさらに急激に増す。我々は，これまでに約 220 K の熱力学的異常性の動的起源を解明してきた。さらに，低温領域の過冷却状態を解析し，

約 195 K で液体状態の構造・動力学が変化する新しい動的転移を発見した。さらに、277 K から 195 K までは高密度および低密度液体の二状態混合系で特徴づけられる水が、195 K 以下では低密度液体状態による一成分系へと変化すること等を示した。また、多くの物質で知られているガラス転移温度 T_G と融点 T_M の間の関係 ($T_G/T_M \sim 2/3$ 。2/3 則) の水における破綻の起源についても考察を行った。

B-1) 学術論文

T. MORI and S. SAITO, “Molecular Mechanism Behind the Fast Folding/Unfolding Transitions of Villin Headpiece Subdomain: Hierarchy and Heterogeneity,” *J. Phys. Chem. B* **120**, 11683–11691 (2016).

M. HIGASHI and S. SAITO, “Quantitative Evaluation of Site Energies and Their Fluctuations of Pigments in the Fenna-Matthews-Olson Complex with an Efficient Method for Generating a Potential Energy Surface,” *J. Chem. Theor. Comput.* **12**, 4128–4137 (2016).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

S. SAITO, “Structure and dynamics of supercooled water,” Pure and Applied Chemistry International Conference 2016, Bangkok (Thailand), February 2016.

S. SAITO, “Simulations of proton transfer and energy transfer in excited states,” 9th International Meeting on Photodynamics and Related Aspects, Mendoza (Argentina), May 2016.

T. MORI, “Molecular Mechanism of Transition Dynamics in Protein Folding,” IAS Focused Program on “Molecular Machines of Life: Simulations Meet Experiment,” Hong Kong (China), May 2016.

S. SAITO, “Dynamics of water and proteins,” 8th International Kasetsart University Science and Technology Annual Research Symposium, Bangkok (Thailand), June 2016.

斉藤真司, 「水の構造とダイナミクス：特異的性質の起源」, 琉球大学理学部海洋自然科学科セミナー, 那覇, July 2016.

S. SAITO, “Structure and dynamics of supercooled water,” Center for Chemical Dynamics in Living Cells, Chung-Ang University, Seoul (Korea), August 2016.

S. SAITO, “Structure and dynamics of supercooled water,” 2016 Annual meeting EMLG-JMLG, Chania (Greece), September 2016.

S. SAITO, “Structure and dynamics of supercooled water,” 4th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2016), Shanghai (China), October 2016.*

斉藤真司, 「揺らぎから物性・機能発現機構の解明へ」, 第3回電子状態シンポジウム, 早稲田大学, 東京, November 2016.

斉藤真司, 「過冷却水の構造と動力学」, Cryopreservation Conference 2016, 岡崎, November 2016.

S. SAITO, “Structure and dynamics of supercooled water,” Indo-Japan Discussion Meeting on Frontiers in Molecular Spectroscopy: From Fundamentals to Applications on Material Science and Biology, Kanpur (India), November 2016.

B-6) 受賞, 表彰

金 鋼, 日本物理学会若手奨励賞 (2010).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

理論化学討論会世話人会委員 (2002–2009).

日本化学会東海支部幹事 (2007–2008).

分子シミュレーション研究会幹事 (2007–2011, 2015–).

分子科学会運営委員 (2008–2012, 2016–).

日中韓理論化学ワークショップ幹事 (2013–).

学会の組織委員等

4th International Conference on Coherent Multidimensional Spectroscopy, Local Organizing Committee (2008).

International Symposium on Reaction Dynamics of Many-Body Chemical Systems, Chair (2009).

12th Japan-Korea Joint Symposium on Molecular Science, Local Organizing Committee (2009).

7th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Local Organizing Committee (2011).

13th Korea-Japan Joint Symposium on Molecular Science, Co-Chair (2011).

Time Resolved Vibrational Spectroscopy 2013, Local Organizing Committee (2013).

IMS Workshop on “Hierarchical Molecular Dynamics: From Ultrafast Spectroscopy to Single Molecule Measurements,” Chair (2013).

14th Japan-Korea Joint Symposium on Molecular Science, Chair (2013).

1st China-Japan-Korea Tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry, Organizing Committee (2013).

2nd China-Japan-Korea Tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry, Co-Chair, Organizing Committee (2015).

Asia Academic Seminar 2015, Organizing Committee (2015).

3rd China-Japan-Korea Tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry, Organizing Committee (2017).

15th Korea-Japan Joint Symposium on Molecular Science, Co-Chair (2017).

2018 Annual meeting EMLG-JMLG, Local organizing Committee (2018).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学研究費委員会専門委員 (2006, 2014, 2015).

科学研究費助成事業評価委員会評価者 (2013, 2015).

情報学研究所運営委員会委員 (2010–2014).

東北大学金属研究所計算材料科学センター 運営委員会委員 (2015–).

核融合科学研究所外部評価委員会数値実験炉研究プロジェクト専門部会国内専門委員 (2012, 2015).

その他

National Research Foundation of Korea 審査員 (2015, 2016).

European Research Council (ERC) 審査員 (2016).

High Performance Computing infrastructure (HPCI) コンソーシアム運営委員会委員 (2013–).

計算物質科学人材育成コンソーシアム次世代研究者育成委員会委員 (2015–).

計算科学研究機構人材育成タスクフォースWG 委員 (2015–).

計算基礎科学ネットワーク拠点分子科学分野委員 (2012–).

計算物質科学スパコン共用事業運営委員会委員 (2015-).
総合研究大学院大学教育研究委員会委員 (2015).
総合研究大学院大学インターンシップ制度検討分科会委員 (2015).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「生体分子シミュレーション入門」, 2016年 12月 15日-16日.
琉球大学理学部海洋自然科学科, 物理化学特別講義, 2016年 7月 19日-20日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A), 「構造揺らぎ・構造変化に基づく生体分子の機能発現の理論的解明」, 斉藤真司 (2016年度-2020年度).
科研費新学術領域研究(研究領域提案型)(公募研究), 「タンパク質の構造変化と化学反応が織り成す協働的な反応機構の解明」, 森 俊文 (2016年度-2017年度).
科研費若手研究(B), 「タンパク質の動的構造と機能発現ダイナミクスの分子論的解明」, 森 俊文 (2015年度-2018年度).
科研費研究活動スタート支援, 「天然変性タンパク質の動的構造と機能発現機構の分子論的解明」, 森 俊文 (2014年度).
科研費基盤研究(B), 「生体分子の構造履歴ダイナミクスと機能発現の分子機構の理論的解明」, 斉藤真司 (2013年度-2015年度).
科研費挑戦的萌芽研究, 「生体分子の構造変化に伴う状態遷移ダイナミクスの解析手法の開発とその応用」, 斉藤真司 (2011年度).
日印共同研究, 「水および水溶液の構造とダイナミクス: 理論と実験」, 斉藤真司 (2010年度-2011年度).
科研費基盤研究(B), 「線形・非線形分光シミュレーションによる緩和および反応ダイナミクスの解明」, 斉藤真司 (2010年度-2012年度).
科研費特定領域研究(計画研究), 「空間・時間不均一ダイナミクス理論の構築」, 斉藤真司 (2006年度-2009年度).
科研費基盤研究(B), 「化学反応および相転移ダイナミクスの多次元振動分光法による理論解析」, 斉藤真司 (2004年度-2006年度).

C) 研究活動の課題と展望

近年の計算機の発達により, 比較的小さなタンパク質に関してはマイクロ秒オーダーの計算が可能となった。さらに, 専用機によりミリ秒スケールのシミュレーションが行われているタンパク質もある。しかし, タンパク質の動的理解に関しては未だに十分に進んでいない。我々は, これまで培ってきたガラスダイナミクスの知見や多次元分光法の解析手法等を用い, タンパク質の不均一な構造変化動力学の解析を進めている。今後は生体分子系における反応の動的効果の解析にも展開していきたい。さらに, pTBの膜内挿入・イオン透過の解析を行い, イオンチャネルにおけるイオン透過に関する包括的理解の獲得とともに, 一分子反応の観点から凝縮系における反応理論の成立の基盤を明らかにしていきたい。また, 生体分子の機能発現解明に関する解析として, 分子からシステムレベルでの時計タンパク質 KaiC の概日リズムの機構, FMO タンパク質における高効率な励起エネルギー移動機構を明らかにしていきたい。以上の研究に加え, 水の特異的物性発現の起源の研究を進める。さらに, 最近, 我々は量子力学に基づく(複素)比熱やエントロピーの解析手法を開発した。これにより, これまで未解明であったガラス化に向かって分子性物質の運動が如何に変化するのか, Kauzmann 温度が如何に決定されるのか等に関する理論研究についても推進する。

信 定 克 幸（准教授）（2004 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：分子物理学，理論化学，計算物質科学

A-2) 研究課題：

- a) ナノ構造体の光応答理論の開発と光・電子機能物質の理論設計
- b) ヘテロ界面系の電子物性と光励起ダイナミクスの理論
- c) 不均一系触媒の第一原理分子動力学計算
- d) 金属クラスターの光電子物性

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 実験技術の飛躍的な進展の結果，最近では，極めて精密な高次ナノ構造体を数 nm 程度以下の精度で作成することが可能となってきた。この様なナノ構造体と光が相互作用すると，従前の光応答では見られなかった局所ナノ領域での近接場光励起ダイナミクスが起こり，そのダイナミクスに起因する新たな光・電子機能が発現することが期待できる。我々は，十数 nm 程度以下の実在系ナノ構造体の光応答を記述するためのナノ光応答理論を開発し，更にその理論に基づく実時間・実空間光励起電子ダイナミクス法（GCEED: Grid-Based Coupled Electron and Electromagnetic field Dynamics）を開発してきた。近接場光励起に起因する二次高調波を用いて，物質を二倍波励起できることを実証した。また，近接場光を用いると，間接バンドギャップ型半導体（例えば，シリコン）を直接的に光励起できることを明らかにした。
- b) 金属，半導体，絶縁体等の異なる物質が接するヘテロ界面が生み出す電子物性は，その多彩な電子的特性解明のための基礎理学的研究に留まらず，多彩さ故に様々な機能発現の鍵を握っていることが多く，新規機能デバイス開発に関わる応用科学，さらには産業開発の分野でも高い注目を浴びている。しかし，その理論的解明は非常に遅れている。我々は，ナノ構造体の光応答の研究において開発してきた計算手法 GCEED を用いて，ヘテロ界面の電子物性を明らかにした。更に，ヘテロ界面系への電圧及び光の印加による電子物性の変化や外場に対する電気応答特性を記述するための理論及び計算手法の開発を進めた。
- c) 数 nm 程度以下の固体表面担持金属ナノクラスターは，有用な触媒として働くことが多くの研究において指摘されている。しかし，貴金属やレアメタル等の非常に高価な原子を使っていることが多く，豊富に存在する安価な原子で代替した触媒の開発が望まれている。本研究課題では第一原理（カー・パリネロ）分子動力学計算を用いて，固体表面担持金属クラスターの触媒反応メカニズムの解明とその代替クラスターの理論設計の研究を行った。また，セリア表面での効果的な CO 酸化，NO 還元触媒反応のメカニズム解明を行った。
- d) 金とチオラートから構成されるクラスターは，その安定性と機能材料への応用の期待から盛んに研究が行われている。昨年に引き続き本年も国内外の実験グループと共同で，金チオラートクラスターの構造や光電子物性の研究を行った。本年度は，異種金属原子のドーピングによる電子物性及び光励起ダイナミクスの変化を明らかにした。

B-1) 学術論文

M. YAMAGUCHI and K. NOBUSADA, “Large Hyperpolarizabilities of the Second Harmonic Generation Induced by Nonuniform Optical Near Fields,” *J. Phys. Chem. C* **120**, 23748–23755 (2016).

- S. SHARMA, S. YAMAZOE, T. ONO, W. KURASHIGE, Y. NIIHORI, K. NOBUSADA, T. TSUKUDA and Y. NEGISHI**, “Tuning the Electronic Structure of Thiolate-Protected 25-Atom Clusters by Co-Substitution with Metals Having Different Preferential Sites,” *Dalton Trans.* **45**, 18064–18068 (2016).
- K. KOIZUMI, K. NOBUSADA and M. BOERO**, “The Absence of a Gap State and Enhancement of the Mars-van Krevelen Reaction on Oxygen Defective Cu/CeO₂ Surfaces,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 20708–20712 (2016).
- Y. NIIHORI, M. EGURO, A. KATO, S. SHARMA, B. KUMAR, W. KURASHIGE, K. NOBUSADA and Y. NEGISHI**, “Improvements in the Ligand-Exchange Reactivity of Phenylethanethiolate-Protected Au₂₅ Nanocluster by Ag or Cu Incorporation,” *J. Phys. Chem. C* **120**, 14301–14309 (2016).
- K. IIDA and K. NOBUSADA**, “Electric Field Effects on the Electronic Properties of the Silicene–Amine Interface,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 15639–15644 (2016).
- M. YAMAGUCHI and K. NOBUSADA**, “Indirect Interband Transition Induced by Optical Near Fields with Large Wave Numbers,” *Phys. Rev. B* **93**, 195111 (9 pages) (2016).
- M. ZHOU, H. QIAN, M. Y. SFEIR, K. NOBUSADA and R. JIN**, “Effects of Single Atom Doping on the Ultrafast Electron Dynamics of M₁Au₂₄(SR)₁₈ (M = Pd, Pt) Nanoclusters,” *Nanoscale* **8**, 7163–7171 (2016).
- C. ZENG, Y. CHEN, K. IIDA, K. NOBUSADA, K. KIRSCHBAUM, K. J. LAMBRIGHT and R. JIN**, “Gold Quantum Boxes: On the Periodicities and the Quantum Confinement in the Au₂₈, Au₃₆, Au₄₄, and Au₅₂ Magic Series,” *J. Am. Chem. Soc.* **138**, 3950–3953 (2016).
- K. KOIZUMI, K. NOBUSADA and M. BOERO**, “Reducing the Cost and Preserving the Reactivity in Noble-Metal-Based Catalysts: Oxidation of CO by Pt and Al-Pt Alloy Clusters Supported on Graphene,” *Chem. –Eur. J.* **22**, 5181–5188 (2016).
- T. YATSUI, T. TSUBOI, M. YAMAGUCHI, K. NOBUSADA, S. TOJO, F. STEHLIN, O. SOPPERA and D. BLOCH**, “Optically Controlled Magnetic-Field Etching on the Nano-Scale,” *Light: Sci. Appl.* **5**, e16054 (7 pages) (2016).
- M. YAMAGUCHI and K. NOBUSADA**, “Photodissociation Path in H₂⁺ Induced by Nonuniform Optical Near Fields: Two-Step Excitation via Vibrationally Excited States,” *Phys. Rev. A* **93**, 023416 (5 pages) (2016).
- K. IIDA, M. NODA and K. NOBUSADA**, “Interface Electronic Properties Between a Gold Core and Thiolate Ligands: Effects on an Optical Absorption Spectrum in Au₁₃₃(SPh-tBu)₅₂,” *J. Phys. Chem. C* **120**, 2753–2759 (2016).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- K. KOIZUMI, K. NOBUSADA and M. BOERO**, “Theoretical Design of a Novel Copper Doped Gold Cluster Supported on Graphene Utilizing Ab Initio Molecular Dynamics Simulations,” *AIP Conf. Proc.* **1702**, 090055 (4 pages) (2015).

B-3) 総説, 著書

- 信定克幸, 「ナノ構造体における実時間・実空間光励起電子ダイナミクス」, *分子シミュレーション研究会会誌* **18 (1)**, 24–28 (2016).

B-4) 招待講演

- K. NOBUSADA**, “Photoelectronic properties of nanostructures at hetero-interface regions,” 252nd American Chemical Society National Meeting & Exposition, DoubleTree by Hilton Hotel Philadelphia Center City, Philadelphia (U.S.A.), August 2016.

信定克幸,「近接場光励起ダイナミクスに現れる2つの本質的な物理素過程」, 理研セミナー, 理化学研究所, 和光市, 2016年6月.

飯田健二,「光や電圧の印加で発現する界面電子的機能の理論」, 7回真空・表面科学若手研究会, 分子科学研究所, 岡崎市, 2016年12月.

野田真史,「近接場光励起ダイナミクスの可視化を用いた解析」, 第1回AVS ユーザーフォーラム, 富士ソフトアキバプラザ, 東京, 2015年8月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域1 (原子・分子分野) 世話人 (2003–2004).

理論化学討論会第3期世話人 (2009–).

次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム 運営委員会委員, 戦略課題小委員会 (第2部会) 委員, 人材育成・教育小委員会委員 (2011–2016).

学会の組織委員等

分子構造総合討論会プログラム委員 (2001).

日韓共同シンポジウム実行委員 (2005).

総研大アジア冬の学校実行委員 (2005–2006).

理論化学シンポジウム運営委員会代表 (2006–2008).

The Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Local Organizing Committee (2009–2011).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構地域振興事業評価委員会専門委員 (2005–2006).

文部科学省科学技術・学術審議会専門委員 (2007–2009).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2013–2015).

その他

筑波大学計算科学研究センター共同研究委員会委員 (2015–).

ハイパフォーマンスコンピューティング研究運営委員会運営委員 (2015–).

ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」課題実施準備委員 (2015–2016).

B-8) 大学での講義, 客員

筑波大学計算科学研究センター, 共同研究員, 2004年8月–.

京都大学実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット, 拠点准教授, 2012年9月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C),「ナノメートルサイズの分子における多電子ダイナミクスの理論的研究」, 信定克幸 (2005年–2007年).
科研費特定領域研究(計画研究),「エネルギー散逸を伴う電子ダイナミクスの理論と材料物性」, 信定克幸 (2006年–2010年).
科研費基盤研究(B),「近接場光励起による金属表面の局所電子ダイナミクスの理論」, 信定克幸 (2009年–2013年).
科研費基盤研究(B),「光エネルギー変換のナノ光学理論と広帯域可視光応答ナノ構造体設計への展開」, 信定克幸 (2013年–2017年).
松尾学術研究助成金,「貴金属クラスターの電子・イオンダイナミクスの理論的研究」, 信定克幸 (2002年–2004年).

C) 研究活動の課題と展望

柔軟な電子構造と化学的性質の多様性を持つナノ構造体は、新規機能を生み出す高い可能性を持っている。更に、ナノ構造体が光と相互作用し、光の自由度を露に取り込むことができれば、従前の電子デバイスや光デバイスとは異なる光・電子融合機能を併せ持った高機能物質の開発へと繋がると期待できる。理論的研究の立場から言えば、実在系に即したナノ構造体を対象として、光と物質(電子系)の露な相互作用を記述するナノ光応答理論の開発を行い、その理論に基づく実用に耐え得る超並列第一原理計算手法の開発が急務である。今後は、これらの理論と計算科学的手法から得られた知見を踏まえ、物質に任意の光・電子機能を付加する指導原理を見出すことが極めて重要になると考える。

柳 井 毅 (准教授) (2007 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：量子化学，理論化学，計算化学

A-2) 研究課題：

- a) 密度行列繰り込み群に基づく多参照電子状態理論の開発
- b) エキシマー発光分子，フォトクロミック有機分子の光化学反応機構の理論解明
- c) 多状態多参照摂動理論の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 当研究グループでは，化学反応や分光特性などを高精度にモデリングする高精度な量子化学的な手法開発を目指している。特に着目するのは，多重化学結合と解離，有機機能性分子，生体反応中心などの共役分子の光化学・スピン物性，金属化合物の擬縮重電子状態などに表れる「複雑な電子状態」であり，その解明は大変興味を持たれている一方で，理論的な取り扱いがチャレンジングな問題（多参照問題）である。多参照電子状態を正しく記述するためのキーとなる物理は，原子間スケールで擬縮退した電子状態に由来する強い電子相関効果であり，この相関効果の問題の複雑さは分子サイズに対して指数関数的に複雑化し，既存の量子化学計算法ではこの現象を効率よく高精度で計算することができない。これまで，当研究室では，このような距離スケールな強い複雑な電子相関を記述するための厳密対角化法，*ab initio* 密度行列繰り込み群（DMRG）法の新しい実装を開発してきた。この手法を利用し，これまで不可能だと思われたサイズの大規模な多参照計算を実現してきている。
- b) 電子励起状態は基底状態よりも遙かに理解が難しく，超高速分光法を用いた高度な実験的解析が行われる一方で，その解釈において理論計算（第一原理計算や量子化学計算と呼ばれる）の役割は重要になっている。励起状態を精密に計算するには，複数の電子配置を基底関数としてその量子的な重ね合わせ状態として電子波動関数を表すことが求められる（多配置法）。近年広く用いられる密度汎関数理論は，単一配置法として分類され，二電子・多電子励起，それに起因する禁制状態に対して誤った記述を与える等の問題点が知られる。本研究では，DMRG 法に基づき，エキシマー発光分子やフォトクロミック化合物に対して多状態のポテンシャル曲面を高精度計算できる拡張開発を行い，それらの電子状態の解析を行っている。エキシマー発光では豊田中央研白井博士と，フォトクロミックでは筑波大重田教授と共同で研究を進めている。
- c) 電子励起状態の波動関数を高精度に求める理論のフレームワークとして，多参照理論に基づく電子状態理論 DMRG-XMS-CASPT2 法を開発した。多参照理論では，波動関数は複数の電子配置の量子的重ね合わせとして記述される。CASPT2 法は既に広く利用されている高精度多参照理論として知られ，計算効率もよく大きな系への適用が期待される。本研究では，CASPT2 法を複数の励起状態を効率よく数値的安定に求めることが可能な拡張理論 XMS-CASPT2 法の実装を行い，DMRG 波動関数を参照関数とする組み合わせを実現した。この拡張理論では，相関した有効ハミルトニアンを部分空間の状態基底で表す。その有効ハミルトニアンを対角化することで状態間の摂動的電子相関を有効に記述することができる。本理論は，高性能な並列計算プログラムとして実装されており，大規模系への高い適用性を有する。

B-1) 学術論文

- M. OKAMURA, M. KONDO, R. KUGA, Y. KURASHIGE, T. YANAI, S. HAYAMI, M. YOSHIDA, K. YONEDA, S. KAWATA and S. MASAOA, “A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation,” *Nature* **530**, 465–468 (2016).
- S. SHIRAI, Y. KURASHIGE and T. YANAI, “Computational Evidence of Inversion of 1L_a and 1L_b Derived Excited States in Naphthalene Excimer Formation from *Ab Initio* Multireference Theory with Large Active Space: DMRG-CASPT2 Study,” *J. Chem. Theory Comput.* **12**, 2366–2372 (2016).
- R. J. HARRISON, G. BEYLKIN, F. A. BISCHOFF, J. A. CALVIN, G. I. FANN, J. FOSSO-TANDE, D. GALINDO, J. R. HAMMOND, R. HARTMAN-BAKER, J. C. HILL, J. JIA, J. S. KOTTMANN, M.-J. YVONNE OU, L. E. RATCLIFF, M. G. REUTER, A. C. RICHIE-HALFORD, N. A. ROMERO, H. SEKINO, W. A. SHELTON, B. E. SUNDAHL, W. S. THORNTON, E. F. VALEEV, Á. VÁZQUEZ-MAYAGOITIA, N. VENCE, T. YANAI and Y. YOKOI, “MADNESS: A Multiresolution, Adaptive Numerical Environment for Scientific Simulation,” *SIAM J. Sci. Comput.* **38**, S123–S142 (2016).
- T. SHIOZAKI and T. YANAI, “Hyperfine Coupling Constants from Internally Contracted Multireference Perturbation Theory,” *J. Chem. Theory Comput.* **12**, 4347–4351 (2016).

B-4) 招待講演

- T. YANAI, “Quantum chemistry with density matrix renormalization group,” The 75th Okazaki Conference “Tensor Network States: Algorithms and Applications,” IMS, Okazaki, January 2016.
- T. YANAI, “Computational quantum chemistry with an efficient many-electron theory: Theory and applications,” Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2016), BITEC, Bangkok (Thailand), February 2016.
- T. YANAI, “Advanced multireference theory based on density matrix renormalization group: theory and applications,” Theory Seminar of Chemistry Department, Northwestern University, Evanston (U.S.A.), March 2016.
- T. YANAI, “Recent progress in multireference dynamic correlation methods based on density matrix renormalization group,” The 251st ACS meeting, San Diego (U.S.A.), March 2016.
- 柳井 毅, 「密度行列繰り込み群に基づく拡張多状態多参照擬縮重摂動理論」, 第10回革新的量子化学シンポジウム, キャンパスプラザ京都 (大学コンソーシアム京都), 京都, 2016年5月.
- T. YANAI, “CASPT2 theory with DMRG reference wavefunction,” The 8th Molecular Quantum Mechanics, Uppsala (Sweden), June–July 2016.
- T. YANAI, “Molecular electronic structure theory based on *ab initio* density matrix renormalization group,” Tensor Networks and Quantum Many-Body Problems (TNQMP2016), ISSP, University of Tokyo, Kashiwa, July 2016.
- T. YANAI, “Molecular electronic structure theory based on *ab initio* density matrix renormalization group,” Theory Seminar of Chemistry Department, University of Michigan, Ann Arbor (U.S.A.), July 2016.
- T. YANAI, “Multireference theory based on density matrix renormalization group,” Theory and Applications of Computational Chemistry 2016, Seattle (U.S.A.), August–September 2016.
- 柳井 毅, 「金属酵素の多参照電子状態計算および鉄五核錯体の密度汎関数計算」, 触媒・電池元素戦略研究拠点第9回公開シンポジウム, 京都大学船井哲良記念講堂国際連携ホール (京大桂キャンパス), 京都, 2016年10月.

B-6) 受賞, 表彰

T. YANAI, *Chemical Physics Letters* Most Cited Paper 2003-2007 Award.

T. YANAI, The Wiley-International Journal of Quantum Chemistry Young Investigator Award (The 49th Sanibel Symposium) (2009).

T. YANAI, Laureate, International Academy of Quantum Molecular Science (2013).

柳井 毅, 分子科学会奨励賞 (2013).

柳井 毅, 日本化学会欧文誌 BCSJ 賞 (2014).

B-7) 学会および社会的活動

その他

「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」 理論・計算分子科学コミュニティWGメンバー (2007-2013).

HPCI 戦略プログラム 分野2「新物質・エネルギー創成」コミュニティメンバー (2010-2016).

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究(公募研究),「実在系の分子理論」, 柳井 毅 (2008年度-2010年度).

科学技術振興機構CREST 研究,「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」, 柳井 毅, 研究分担 (2008年度-2009年度).

科研費基盤研究(C),「高精度多参照理論による大規模 π 共役系の強相関的な多電子励起状態の解析法と応用」, 柳井 毅 (2009年度-2011年度).

科研費基盤研究(B),「非経験的密度行列繰り込み群法を基軸とする多状態間電子過程の理論構築と応用」, 柳井 毅 (2013年度-2015年度).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型)「高次複合光応答分子システムの開拓と学理の構築」(公募研究),「高位電子励起状態の高精度計算に向けた電子論の開発と光化学分子への応用」, 柳井 毅 (2015年度-2016年度).

科研費基盤研究(B),「高精度電子論に基づく磁気分光シミュレーション法による金属酵素・触媒の反応性解明」, 柳井 毅 (2016年度-2018年度).

B-11) 産学連携

(株)豊田中央研究所,「エキシマー発光に関する発光機構の理論的解明」, 柳井 毅 (2016年).

C) 研究活動の課題と展望

当該研究活動で当面課題とする問題は, 多参照な電子状態(電子が強く相関する状態)であり, 理論的な取り扱いにはチャレンジングな問題(多参照問題)である。問題の複雑さは, 問題のサイズ(分子サイズ)に対して指数関数的に複雑化するので, この問題を解くのはなかなか容易ではない。当研究グループが開発を進める「密度行列繰り込み群(DMRG)」[DMRG-正準変換理論][DMRG-CASPT2][DMRG-MRCI]は, いままでにない大規模でプレディクティブな多参照量子化学計算であることを実証してきた。本手法の威力を発揮して, 未知なる電子状態を解明する理論計算を推し進める。

理論分子科学第二研究部門

石 崎 章 仁（教授）（2016 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：理論物理化学

A-2) 研究課題：

a) 凝縮相化学動力学の量子理論

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1つの一重項励起状態から2つの三重項励起状態に分裂する過程であり、ペンタセン等の有機結晶で観測されている。この現象を利用することで有機太陽電池の光電変換効率の向上が期待されるため、フィッシュンの反応速度を支配する分子機構の解明に向けて近年多くのグループによって盛んに研究されている。最近報告されたペンタセン誘導体のいくつかの超高速分光実験により、分子内振動モードが超高速のフィッシュン過程の実現に重要な役割を果たす可能性が示唆されている。しかし、従来の多くの量子動力学理論による研究では、分子内振動が誘起する電子状態の揺らぎの記述はタンパク質環境、溶媒による揺らぎの記述に適切である *overdamped* ブラウン振動子モデルによって粗視化され、分子内振動の物理的描像を無視した揺らぎの記述に基づいてフィッシュンの解析が行われてきた。本研究では、分子内振動による揺らぎの記述に *underdamped* ブラウン振動子モデルを用いることで、理論モデルと分光データの整合性の取れたフィッシュン反応のモデル化を試み、分子内振動モードがフィッシュン反応のダイナミクスに与える影響について解析した。本研究の理論モデルは分光実験によるペンタセン誘導体のフィッシュン速度、温度依存性、二次元電子分光の振動コヒーレンスの寿命を再現できている。このモデルの解析によって、従来の理論研究の予測と異なりフィッシュンのダイナミクスが分子内振動モードの振動数に非常に敏感であることを示した。また、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、分子内振動の振動数の値がどのような条件のときにフィッシュンの反応速度が最適化されるかを検討した。

B-1) 学術論文

Y. FUJHASHI and A. ISHIZAKI, “Fluctuations in Electronic Energy Affecting Singlet Fission Dynamics and Mixing with Charge-Transfer State: Quantum Dynamics Study,” *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 363–369 (2016).

Y. FUJHASHI, G. R. FLEMING and A. ISHIZAKI, “Influences of Quantum Mechanically Mixed Electronic and Vibrational Pigment States in 2D Electronic Spectra of Photosynthetic Systems: Strong Electronic Coupling Cases,” *J. Chin. Chem. Soc.* **63**, 49–56 (2016). (Invited)

K. SUN, Y. FUJHASHI, A. ISHIZAKI and Y. ZHAO, “A Variational Master Equation Approach to Quantum Dynamics with Off-Diagonal Coupling in a Sub-Ohmic Environment,” *J. Chem. Phys.* **144**, 204106 (8 pages) (2016).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. TERAMOTO, N. H. LEWIS, T. OLIVER, A. ISHIZAKI and G. R. FLEMING, “Revealing the Excited State Dynamics of Betaine-30 Using Two-Dimensional Electronic-Vibrational Spectroscopy,” *International Conference on Ultrafast Phenomena (Ultrafast Phenomena 2016)*, paper UTu4A.3 (2016).

B-4) 招待講演

石崎章仁,「Sir Martin Wood Prize Lecture: 実時間量子散逸系理論の開発とその分子系励起ダイナミクスへの展開」, 大阪大学シグマホール, 豊中市, 2016年12月.

石崎章仁,「第18回サー・マーティン・ウッド賞受賞講演: Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems」, 英国大使館大使公邸, 東京都千代田区, 2016年11月.

A. ISHIZAKI, “Interplays between quantum effects and dynamic fluctuations in photosynthetic light harvesting,” Workshop of Quantum Simulation and Quantum Walks 2016, Prague (Czech), November 2016.

A. ISHIZAKI, “Interplays between quantum effects and dynamic fluctuations in photosynthetic light harvesting and application to an organic photovoltaic system,” Indo-Japan Discussion Meeting on Frontiers in Molecular Spectroscopy: From Fundamentals to Applications on Material Science and Biology, Indian Institute of Technology Kanpur, Kanpur (India), November 2016.

石崎章仁, “Interplays between quantum effects and dynamic fluctuations in photosynthetic light harvesting,” 国立情報学研究所, 東京都千代田区, 2016年10月.

石崎章仁, “Interplays between quantum effects and dynamic fluctuations in photosynthetic light harvesting,” 理化学研究所, 和光市, 2016年9月.

石崎章仁,「光合成光捕集系におけるエネルギー移動, 電荷移動: 光学応答と量子ダイナミクス」, 第56回分子科学若手の会夏の学校, 京都大学, 京都市, 2016年8月.

A. ISHIZAKI, “Quantum dynamics in photosynthetic light harvesting,” Solar Fuel Catalyst Workshop, Seoul National University, Seoul (Korea), May 2016.

A. ISHIZAKI, “Effects of vibrational modes on 2D electronic spectra and energy transfer dynamics in photosynthetic systems,” DOE Workshop on Optimal Coherence in Chemical and Biophysical Dynamics, Washington DC (U.S.A.), April 2016.

石崎章仁,「第10回若手奨励賞受賞講演: 凝縮相量子動力学理論に基づく光合成エネルギー移動・電荷分離過程の理論研究」, 日本物理学会第71回年次大会, 東北学院大学, 仙台市, 2016年3月.

A. ISHIZAKI, “Quantum dynamics in photosynthetic light harvesting,” 7th OCARINA International Symposium, Osaka City University, Osaka (Japan), March 2016.

石崎章仁,「光合成光捕集系におけるエネルギー・電荷移動ダイナミクス: 量子動力学と光学応答」, 日立製作所中央研究所, 国分寺市, 2016年3月.

石崎章仁,「凝縮相量子ダイナミクス理論と光合成エネルギー移動・電荷分離への展開」, 奈良女子大学理学部物理学科, 奈良市, 2016年2月.

A. ISHIZAKI, “Fluctuations in electronic energy affecting singlet fission dynamics and mixing with charge-transfer state: Quantum dynamics study,” Pure and Applied Chemistry International Conference 2016 (PACCON2016), Bangkok (Thailand), February 2016.

石崎章仁,「凝縮相量子ダイナミクス理論とその光合成初期過程への展開」, “量子と生命”研究会, 大阪大学基礎工学研究科, 豊中市, 2016年2月.

B-6) 受賞, 表彰

石崎章仁, 第18回サー・マーティン・ウッド賞 (2016).

A. ISHIZAKI, The Best Article Award 2016 of Journal of the Chinese Chemical Society (2016).

石崎章仁, 第10回凝縮系科学賞 (2015).

石崎章仁, 日本物理学会第10回若手奨励賞 (2015).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

量子科学技術研究開発機構 The 1st QST International Symposium プログラム委員 (2016–2017).

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

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

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

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

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

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

その他

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

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

第56回分子科学若手の会夏の学校第2分科会「凝縮相化学動力学の理論—光学応答と量子動力学」講師 (2016.8.22–25).

B-8) 大学での講義, 客員

名古屋大学大学院理学研究科, 客員教授, 2016年4月–2017年3月.

東京理科大学理学部, 特別講義「生命を支える光——光合成の物理と化学」, 2016年12月3日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「理論化学」, 2016年7月.

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、昨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。

計算分子科学研究部門

江 原 正 博（教授）（2008 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：量子化学，光物性化学，理論精密分光，理論触媒化学

A-2) 研究課題：

- a) 高精度電子状態理論の開発と光電子過程への応用
- b) 不均一系触媒の理論化学

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 電子共鳴状態を研究する手法として，複素吸収ポテンシャル（Complex Absorbing Potential, CAP）に基づく射影型 CAP/SAC-CI 法を開発している。最近，我々は分子の周囲を滑らかに囲む新しい smooth Voronoi ポテンシャルを開発した。このポテンシャルを用いると，緩和・外挿法や CAP 法において，共鳴位置や寿命に関してパラメータ依存性が少なく，安定に計算できることを示した。さらに，空間的に広がった構造のクラスターや複雑な形状をもつ比較的大規模系の共鳴状態に適用できることを示した。この CAP/SAC-CI 法を，DNA や RNA の核酸塩基およびその誘導体，ニトリル及びイソニトリル基を含む分子の電子付加共鳴状態に適用し，電子透過スペクトルに新しい帰属を与えた。特に，最低エネルギー状態だけでなく，より高い電子共鳴状態についても計算できることを示した。さらに，共鳴状態の through-bond 相互作用の検討や計算手法・摂動選択に関するベンチマーク計算を実施した。
- b) 溶液中の光化学においては，反応分子の励起状態を介した光化学反応と，反応分子と溶媒との間での電子移動による光イオン化が競合する場合があります。光化学反応の特異性や選択性を損ねてしまう。そのため，溶液中の光化学では，競合反応を考慮した反応メカニズムの解析が重要である。その例として，ヒドロキシラジカル前駆体として知られている *N*-hydroxypyridine-2(1*H*)-thione (N-HPT) において光化学的な OH ラジカル解離反応と光イオン化反応が競合する事を，PCM SAC-CI 法による量子化学計算で明らかにした。光反応としては，最低エネルギーの $\pi\pi^*$ 状態に励起された分子が，OH 解離の反応座標に沿った $\pi\pi^*$ と $\pi\sigma^*$ 状態間での円錐交差を経て，解離型のポテンシャルエネルギー面に移行する。さらに基底状態との円錐交差を経て，ラジカル型の解離生成物へと反応が進行することを見出した。中性条件においては可視～近紫外光の照射により，光解離とイオン化反応が競合しうることが示された。この計算手法は，溶液中や凝集相における多くの光化学に応用可能である。
- c) ピコ秒のポンプ・プローブの実験と協力して，シンナメート誘導体（p-MMC, p-MEC）の励起緩和ダイナミクスについて研究した。 S_1 励起状態（ $^1\pi\pi^*$ ）から多段階の非断熱遷移や系間交差を経て， T_1 状態（ $^3\pi\pi^*$ ）まで緩和する経路を明らかにした。SAC-CI 法を用いて，ポンプ・プローブ実験で利用するイオン化状態の終状態に関して検討を行った。また，コンフォメーションを制御したカルボヘキサシランの励起状態について詳細に解析を行い， σ 共役によって吸収スペクトルが大きく変化する要因を明らかにした。特に，紫外・可視，磁気円二色性，直線二色性スペクトルについて，励起状態に関してコンシステントな解析を行い，観測されたスペクトルの詳細な帰属を行った。直鎖ヘキサシランの励起状態を解析し，励起状態の σ 性・ π 性を明らかにし，複数の二面角の変化による状態の相互作用や擬交差を理論的に明らかにした。
- d) 擬不均一系触媒である凝縮相金・パラジウム合金微粒子触媒は，室温で C-Cl 結合を活性化する。この反応の理論解析のために，合金微粒子の構造やスピン状態を遺伝的アルゴリズムおよび DFT 計算によって明らかにし，反応の全過

程のメカニズムを解明した。本反応では、ジメチルホルムアミドからの水素移動が律速段階であり、水分子を介した水素移動によって遷移状態が安定化する結果が得られた。また、保護マトリックスである高分子の構成分子 (Ethylpyrrolidone, EP) と水分子、合金クラスターの分子シミュレーションを行い、界面のダイナミクスについて検討した。合金クラスターと EP 分子との相互作用は、水分子との相互作用よりも強いことから、EP が優先的にクラスター表面に吸着する結果が得られ、吸着構造や吸着自由エネルギーの EP 濃度依存性を明らかにした。また、動径分布関数から、クラスター表面では水分子は水素結合ネットワークを形成しているが、EP が高濃度の場合には、高エネルギーの孤立した水分子がクラスター周辺に存在し、反応に有効であることを明らかにした。

B-1) 学術論文

K. YAMAZAKI, Y. MIYAZAKI, Y. HARABUCHI, T. TAKETSUGU, S. MAEDA, Y. INOKUCHI, S. KINOSHITA, M. SUMIDA, Y. ONITSUKA, H. KOHGUCHI, M. EHARA and T. EBATA, “Multi-Step Intersystem Crossing Pathways in Cinnamate-based UV-B Sunscreens,” *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 4001–4007 (2016).

P. ZHAO, X. ZHAO and M. EHARA, “Regioselectivity of $\text{Sc}_2\text{C}_2@C_{3v}(8)\text{-C}_{82}$: Role of the Sumanene-Type Hexagon in Diels–Alder Reaction,” *J. Org. Chem.* **81**, 8169–8174 (2016).

W.-J. GUAN, P. ZHAO, Q.-Z. LI, S. NAGASE, M. EHARA and X. ZHAO, “ $\text{Sc}_3\text{N}@C_8(39715)\text{-C}_{82}$: A Missing Isomer Linked to $\text{Sc}_3\text{N}@C_{2v}(39718)\text{-C}_{82}$ by a Single Step Stone-Wales Transformation,” *RSC Adv.* **6**, 75588–75593 (2016).

A. GUPTA, B. BOEKFA, H. SAKURAI, M. EHARA and U. DEVA PRIYAKUMAR, “Structure, Interaction and Dynamics of Au/Pd Bimetallic Nanoalloys Dispersed in Ethylpyrrolidone, Monomeric Moiety of Polyvinylpyrrolidone (PVP),” *J. Phys. Chem. C* **120**, 17454–17464 (2016).

Y. KANAZAWA, H. TSUJI, M. EHARA, R. FUKUDA, D. L. CASHER, K. TAMAO, H. NAKATSUJI and J. MICHL, “Electronic Transitions in Conformationally Controlled Peralkylated Hexasilanes,” *ChemPhysChem* **19**, 3010–3022 (2016).

J. MEEPRASERT, S. NAMUANGRUK, B. BOEKFA, R. N. DHITAL, H. SAKURAI and M. EHARA, “Mechanism of Ullmann Coupling Reaction of Chloroarene on Au/Pd Alloy Nanocluster: A DFT Study,” *Organometallics* **35**, 1192–1201 (2016).

R. FUKUDA and M. EHARA, “Electronic Excitation and Ionization Behavior of N-hydroxypyridine-2(1H)-thione and its Deprotonated Anion in a Polarizable Medium Studied Using Quantum Chemical Computations,” *Theor. Chem. Acc.* **135**, 105 (9 pages) (2016).

S. GURTU, S. RAI, M. EHARA and U. DEVA PRIYAKUMAR, “Ability of Density Functional Theory Methods to Accurately Model the Reaction Energy Pathways of the Oxidation of CO on Gold Cluster: A Benchmark Study,” *Theor. Chem. Acc.* **135**, 93 (12 pages) (2016).

Y. KANAZAWA, M. EHARA and T. SOMMERFELD, “Low-Lying π^* Resonances of Standard and Rare DNA or RNA Bases Studied by the Projected CAP/SAC-CI Method,” *J. Phys. Chem. A* **120**, 1545–1553 (2016).

R. ZHAO, Y. GUO, P. ZHAO, M. EHARA, S. NAGASE and X. ZHAO, “Warning to Theoretical Structure Elucidation of Endohedral Metallofullerenes,” *J. Phys. Chem. C* **120**, 1275–1283 (2016).

M. EHARA, R. FUKUDA and T. SOMMERFELD, “Projected CAP/SAC-CI Method with Smooth Voronoi Potential for Calculating Resonance States,” *J. Comput. Chem.* **37**, 242–249 (2016).

S. NAMUANGRUK, S. JUNGSTTIWONG, N. KUNGWAN, V. PROMARAK, T. SUDYODSUK, B. JANSANG and M. EHARA, “Coumarin-Based Donor- π -Acceptor Organic Dyes for a Dye-Sensitized Solar Cell: Photophysical Properties and Electron Injection Mechanism,” *Theor. Chem. Acc.* **135**, 14 (13 pages) (2015). (special issue on Health & Energy from the Sun: a Computational Perspective)

B-3) 総説, 著書

R. FUKUDA and M. EHARA, “Electronic Excitation of Molecules in Solution Calculated Using the SAC-CI Method in the Polarizable Continuum Model,” *AIP Conf. Proc. (ICCMSE 2015)* **1702**, 090012 (2015).

B-4) 招待講演

M. EHARA, “Recent Progress in PCM SAC-CI and CAP/SAC-CI,” The 15th Theoretical Chemistry Symposium (TCS), Hyderabad (India), December 2016.

M. EHARA, “Charge Transfer Excitations Studied by the SAC-CI Method,” International Workshop on Excited States in Complex Systems (ESCS 2016), Paris (France), November 2016.

M. EHARA, “Element Strategy for Catalysts and Batteries,” Southeastern Louisiana University, Hammond (U.S.A.), October 2016.

M. EHARA, “Relevance of Interface Region in Supported Nanocluster Catalysts,” EMN Meeting on Computation and Theory Energy Materials Nanotechnology, Las Vegas (U.S.A.), October 2016.

M. EHARA, “Recent Developments and Applications of SAC-CI,” Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2016), Seattle (U.S.A.), August–September 2016.

M. EHARA, “Electronic Resonance States Studied by CAP/SAC-CI,” ISTCP IX 2016 Conference, Grand Forks (U.S.A.), July 2016.

M. EHARA, “DFT Study on Nanocluster and Heterogeneous Catalysts,” International Symposium on Novel Chemistry and Engineering, VISTEC, Rayong (Thailand), June 2016.

M. EHARA, “Photocatalysis on Metal Oxides: DFT study,” Ninth International Congress for Innovation in Chemistry (PERCH-CIC Congress IX), Pattaya (Thailand), June 2016.

江原正博, 「触媒・電池元素戦略における理論研究のアプローチ」, CSJ 化学フェスタ「触媒・電池の創造戦略～実験と理論計算科学のインタープレイ～」, 東京, 2016年11月.

江原正博, 「非対称金属配位場を有する超分子系に関する理論研究」, 日本化学会「配位アシンメトリー: 非対称分子設計と異方集積化に基づく新物質科学」, 京都, 2016年3月.

江原正博, 「非対称配位場をもつ金属錯体の光学物性と触媒活性: 理論計算化学からのアプローチ」, 分子研研究会「金属錯体の非対称配位場設計と異方集積化が拓く新物質創成科学」, 岡崎, 2016年3月.

江原正博, 「金属微粒子触媒の理論計算化学」, コンピュータ化学部会第95回例会, 大阪, 2016年1月.

B-6) 受賞, 表彰

江原正博, APATCC (Asia-Pacific Association of Theoretical & Computational Chemists) Pople Medal (2009).

江原正博, QSCP (Quantum Systems in Chemistry and Physics) Promising Scientist Award of CMOA (Centre de Mecanique Ondulatoire Appliquee) (2009).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

近畿化学協会幹事 (2007–2013).

日本化学会東海支部常任幹事 (2011–2012, 2015–2016).

日本化学会東海支部会計幹事 (2016).

触媒学会元素戦略研究会世話人会委員 (2013–).

触媒学会界面分子変換研究会世話人会委員 (2015–).

学会の組織委員等

XIIth International Congress of Quantum Chemistry, Kyoto, Japan, Local Committee Member (2006).

VIIth Congress of International Society for Theoretical Chemical Physics, Organization Committee (2008).

第3回分子科学討論会実行委員 (2009).

The Vth Japan-Czech-Slovakia (JCS) Symposium on Theoretical Chemistry, Nara, Japan, Vice President, Organization Committee (2012–2013).

Charge Transfer Modeling in Chemistry: New Methods and Solutions for a Long-Standing Problem, Paris, France, Organization Committee (2014–2015).

Pacificchem 2015: Symposium (#277) Interplay between Theory and Experiment in Catalytic Research, Corresponding Symposium Organizer (2014–2015).

Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, Local Committee (2016).

第33回化学反応討論会 2017実行委員 (2016–2017).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2012–2013).

学会誌編集委員

Journal of Computational Chemistry, Editor (2012–).

Theoretical Chemistry Accounts, Editorial Board (2015–).

Theoretical Chemistry Accounts, Special Issue of Charge Transfer Modeling in Chemistry, Guest Editor (2015–2016).

The Chemical Record, Editorial Board (2015–).

The Chemical Record, Special Issue of “Challenges in Catalysis: From Theory to Experiment,” Guest Editor (2015–2016).

その他

元素戦略プロジェクト「実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点」 電子論グループ・リーダー (2012–2022).

次世代スパコン戦略プログラム「計算物質科学イニシアティブ」 CMSI 運営委員会委員, 企画室会議委員, 第3部会小委員会委員 (2011–2015).

シミュレーションによる「自然科学における階層と全体」連携研究委員会委員 (2016).

量子化学ウィンタースクール世話人 (2011–2016).

計算物質科学人材育成コンソーシアムイノベーション創出人材育成委員会委員 (2015–2016).

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 ナノ統合ソフト担当 (2008–2011).

B-8) 大学での講義, 客員

大阪大学大学院工学研究科, 集中講義「計算機化学」, 2016年4月21日-22日.

京都大学大学院工学研究科, 「量子化学II」, 2016年4月-7月.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 集中講義「理論化学」, 2016年7月12日-14日.

京都大学実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット, 拠点教授, 2012年9月-.

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域研究「配位アシンメトリー：非対称配位圏設計と異方集積化が拓く新物質科学」(代表：塩谷光彦)(計画研究), 「非対称金属配位場を有する超分子系の構造・物性・反応に関する理論研究」, 江原正博 (2016年-2020年).

科研費基盤研究(B), 「複雑量子状態の理論開発とナノ・バイオ系への応用」, 江原正博 (2016年-2018年).

元素戦略プロジェクト「実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点」, 江原正博 (2012年-2021年).

科研費基盤研究(B), 「強相関電子状態と電子共鳴状態の基礎理論の開発と複雑な量子状態への応用」, 江原正博 (2012年-2015年).

科研費基盤研究(B), 「内殻電子過程の超精密理論分光」, 江原正博 (2009年-2011年).

科学技術振興機構CREST研究, 「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」, 江原正博, 研究分担 (2008年-2012年).

科研費特定領域研究(計画研究), 「高精度電子状態理論の開発と励起状態化学への展開」, 江原正博 (2006年-2009年).

科研費基盤研究(C), 「分子システムを対象とした電子励起状態理論の開発と光合成系の電子メカニズムの解明」, 福田良一 (2014年-2016年).

C) 研究活動の課題と展望

我々は、高精度電子状態理論を基盤として、光の関わる化学現象や微粒子およびバルク触媒を主たる対象とした、新しい化学概念を構築することを目的として研究を進めている。近年、電子状態理論では大規模化が進展し、ナノ材料やバイオ系への応用が展開している。しかし、複雑な励起状態や固体表面などに対して信頼性のある情報を提供できる理論は未だ開発途上にあり、さらに高めていく必要がある。また、ダイナミクスや統計力学も化学現象を解明するために重要である。これらの理論化学によって、化学現象の本質を研究することを目指している。高機能化と大規模化の観点から我々の方法を発展させるとともに、固体表面を高精度に記述できる理論開発を行う。光機能性分子の電子過程の研究では、励起状態における構造緩和や分子間相互作用について検討し、分子システムとしての機能設計へと展開したい。非対称性に関わるエキシトン・カップリングや非対称因子、錯体光化学反応に関する理論研究を実験と協力して進める。また、表面-分子系の電子状態を適切に表現できる方法を確立し、微粒子触媒、バルク触媒、表面光化学を理論的に解析する。元素戦略プロジェクトで重要課題である自動車排ガス浄化触媒や化成品合成触媒に関する研究を実施する。

奥村久士（准教授）（2009年5月1日着任）

A-1) 専門領域：理論生物物理学，理論化学物理学

A-2) 研究課題：

- a) アミロイド線維の末端構造の理論的解明
- b) 親水性／疎水性界面におけるアミロイド β ペプチドの構造の理論的研究
- c) 多変数レプリカ置換法の開発
- d) 生体分子と金属イオンを含む系に有効な高速量子・古典混合計算法の開発
- e) 高速分子動力学シミュレーションプログラム GEMB の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) アミロイド線維はタンパク質が間違っ折りたたみ、凝集することによってできた不溶性の線維である。アミロイド線維は 40 種類以上の病気の原因となっている。例えば、アルツハイマー病はアミロイド β ($A\beta$) ペプチドが凝集してできたアミロイド線維が原因ではないかと言われている。アミロイド線維の伸長は末端に $A\beta$ 1 分子が順次結合して β シート構造に変化することで起きるため、末端構造を明らかにすることはアミロイド線維形成を理解する上で重要である。しかし、アミロイド線維の末端領域は 1～2 分子しかないため、実験では観察困難である。そこで分子動力学シミュレーションによりアミロイド線維末端の構造を調べてきた。昨年度はアミノ酸 42 残基からなる $A\beta_{42}$ について調べた。今年度はアミノ酸 40 残基からなる $A\beta_{40}$ についても調べ、さらに計算時間を延長し統計を増やした。その結果、一方の端では 2 本の β シートが離れているのに対し、もう一方では閉じたままになっていることを実験に先駆けて発見した。またその現象は 2 枚の β シート β_1 と β_2 の水素結合の強さの違いと $A\beta$ アミロイド線維の形状に起因していることも解明した。この発見はアミロイド線維の伸長機構を理解するのに役立つと考えられる。
- b) $A\beta$ ペプチドによるアミロイド線維形成は糖鎖と脂質膜の界面、あるいは水と空気の界面のような親水性／疎水性界面で促進されることが実験的に報告されている。しかし、界面における分子レベルでの凝集機構はまだ分かっていない。そこで我々は親水性／疎水性界面での $A\beta$ ペプチドの分子動力学シミュレーションを行った。その結果、親水性／疎水性界面では β_1 と β_2 に相当する部分で β ヘアピン構造を形成することが多いことが分かった。昨年度までの我々のシミュレーションにより、分子内の β シート構造、すなわち β ヘアピン構造が増えると分子間での β シート構造が形成されやすくなることが分かっている。このことから界面で形成される β ヘアピン構造が分子間 β シート構造の形成を促進し、界面での凝集を加速していると考えられる。界面で β ヘアピン構造が形成されやすい理由についても考察した。 β_1 と β_2 は共に界面にしか存在しないためバラバラに運動してエントロピーを高くするよりも、 β_1 と β_2 が結合してエンタルピーを低くする方が自由エネルギーを下げられるからであると考えられる。
- c) 数値計算を用いた生体分子の解析には、分子力場 (MM) による古典分子動力学が広く用いられる。 $A\beta$ ペプチドは金属イオンが存在すると凝集が加速されることが知られているが、分子力場を用いた計算では $A\beta$ ペプチドと金属イオンの相互作用を充分に取り込むことができない。このような系を取り扱う手法として、一部分を量子力学 (QM) 的に取り扱う量子・古典混合 (QM/MM) 計算が注目されている。しかし、周期境界条件下でのクーロン項の計算にはこれまで Ewald 法が用いられてきたが、これには計算時間が非常にかかるという問題がある。そこで古典分子動力学計算において用いられてきた particle mesh Ewald (PME) 法を QM 計算に適用し、高速 QM/MM 計算を実現す

る方法を開発した。実際この手法を水中の A β ペプチドと亜鉛イオンからなる系に適用したところ、従来の方法に比べて 167 倍の高速化に成功した。

- d) タンパク質など生体分子系の分子動力学シミュレーションを素朴に行うと自由エネルギー極小状態にとらわれ、十分な構造サンプリングができない。この問題を解決するために以前、我々はレプリカ置換法を開発した。この方法はレプリカ交換法を発展させた手法である。レプリカ交換法では、2つのパラメータ間でその値の交換を試みるのに対し、レプリカ置換法では3つ以上のパラメータの置換を試みる。さらにレプリカ置換法では、メトロポリス法の代わりに諏訪・藤堂の方法を用いることで、レプリカ置換の棄却率を最小化する。そのため離れたパラメータ間におけるパラメータ値の交換が発生し、サンプリング効率を向上させることができる。これまでのレプリカ置換法ではカノニカルアンサンブルにおいて、1変数のみの置換を行ってきた。今年度はレプリカ置換法を定温定圧アンサンブルに拡張し、温度と圧力の2変数を置換する定温定圧レプリカ置換法を開発した。この新しい手法をシニョリンに適応したところ、レプリカ交換法に比べてサンプリング効率を2倍以上改善することに成功した。
- e) 大規模・長時間にわたる分子動力学シミュレーションを行うため、これまでに独自の高速分子動力学プログラム GEMB (Generalized-Ensemble Molecular Biophysics) を開発してきた。このプログラムの特長は①拡張アンサンブル法を用いて効率よく構造サンプリングを行う、②シンプレクティック解法を用いて安定かつ高速に計算できることである。昨年度からこのプログラムの MPI による並列化に取り組み、水分子の計算について並列化率 99.99994394% という非常に高い並列化計算性能を達成した。現在タンパク質など全ての原子についての並列化を進めている。今後、この高速計算プログラムをスパコン上で用いることで大規模・長時間分子動力学シミュレーションを実現できると考えている。

B-1) 学術論文

H. OKUMURA and S. G. ITOH, “Structural and Fluctuational Difference between Two Ends of A β Amyloid Fibril: MD Simulation Predicts Only One End Has Open Conformations,” *Sci. Rep.* **6**, 38422 (9 pages) (2016).

R. GUPTA, S. SAITO, Y. MORI, S. G. ITOH, H. OKUMURA and M. TOMINAGA, “Structural Basis of TRPA1 Inhibition by HC-030031 Utilizing Species-Specific Differences,” *Sci. Rep.* **6**, 37460 (14 pages) (2016).

H. NISHIZAWA and H. OKUMURA, “Rapid QM/MM Approach for Biomolecular Systems under Periodic Boundary Conditions: Combination of the Density-Functional Tight-Binding Theory and Particle Mesh Ewald Method,” *J. Comput. Chem.* **37**, 2701–2711 (2016).

S. G. ITOH and H. OKUMURA, “Oligomer Formation of Amyloid- β (29-42) from Its Monomers Using the Hamiltonian Replica-Permutation Molecular Dynamics Simulation,” *J. Phys. Chem. B* **120**, 6555–6561 (2016).

W. KHUNTAWE, T. RUNGROTMONKOL, P. WOLSCHANN, P. PONGSAWASDI, N. KUNGWAN, H. OKUMURA and S. HANNONGBUA, “Conformation Study of ϵ -Cyclodextrin: Replica-Exchange Molecular Dynamics Simulations,” *Carbohydr. Polym.* **141**, 99–105 (2016).

S. RUIZ-BARRAGAN, K. ISHIMURA and M. SHIGA, “On the Hierarchical Parallelization of Ab Initio Simulations,” *Chem. Phys. Lett.* **646**, 130–135 (2016).

齊藤天菜, 望月祐志, 山崎大, 石村和也, 「Intel Xeon Phi 上での SMASH による並列化 DFT 計算の性能評価」, *J. Comput. Chem. Jpn.* **15**, 92–96 (2016).

B-3) 総説, 著書

森 義治, 奥村久士, 「分子動力学シミュレーションで探るタンパク質・ペプチドの圧力変性」, *生物物理* **56**, 212–216 (2016).
伊藤 暁, 奥村久士, 「レア・イベントを捕えるための新たな分子シミュレーション手法——アミロイド線維形成の理解に向けた取り組み——」, *日本物理学会誌* **71**, 463–468 (2016).

B-4) 招待講演

奥村久士, 「アミロイド線維の分子動力学シミュレーション」, 平成28年度自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト「生物の形態形成の多様性の細胞レベルでの共通原理の解明とそのための統計数理学的方法の開発」ミーティング, 基礎生物学研究所, 2016年12月.

奥村久士, 「各種統計アンサンブルの生成法」, 第10回分子シミュレーションスクール——基礎から応用まで——, 分子科学研究所, 2016年10月.

奥村久士, 「分子動力学シミュレーションの基礎と生体分子の動的秩序形成研究への応用」, 第3回新学術領域研究「動的秩序と機能」若手研究会, 加賀観光ホテル, 加賀, 2016年10月.

奥村久士, 「分子動力学シミュレーションによるアミロイド β ペプチドの集合と離散」, 第四回CUTE シンポジウム: コンピュータ化学, 三重大学, 津, 2016年6月.

奥村久士, 「分子動力学シミュレーションによるアミロイド線維の離合集散」, 日本化学会第96春季年会特別企画「どこまで明らかになったか? 自己組織化のメカニズム: アミロイド形成から人工系」, 同志社大学, 京田辺, 2016年3月.

奥村久士, 「分子動力学シミュレーションで探るアミロイド β ペプチドの凝集, 離散」, CAMD セミナー, 国立長寿医療研究センター, 大府, 2016年2月.

H. OKUMURA, “Computational molecular science to reveal dynamical ordering of amyloid fibril,” Okazaki Institute for Integrative Bioscience Retreat, Mikawawan Resort Linx, Nishio (Japan), November 2016.

H. OKUMURA, “Dynamical ordering of amyloid fibril studied by molecular dynamics simulations,” Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang Mai University, Chiang Mai (Thailand), November 2016.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations to study dynamical ordering of amyloid fibril,” 2016 NCTS October Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, National Tsing Hua University, Hsinchu (Taiwan), October 2016.

H. OKUMURA, “Suwa-Todo algorithm in generalized-ensemble algorithms: Replica-permutation and simulated tempering methods,” Free Energy Landscape of Protein Folding and Dynamics by Simulations based on Enhanced Conformational Sampling Algorithms, Nagoya University, Nagoya (Japan), July 2016.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations for assembly and disassembly of A β amyloid fibrils,” 8th IKUSTAR, Kasetsart University, Bangkok (Thailand), June 2016.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations of amyloid fibrils,” 2016 NCTS March Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, National Tsing Hua University, Hsinchu (Taiwan), March 2016.

H. OKUMURA, “Pressure induced structural change of proteins by molecular dynamics simulations,” Eighth Japan-Korea Seminars on Biomolecular Sciences, Institute for Molecular Science, Okazaki (Japan), February 2016.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations of proteins under high pressure,” Pure and Applied Chemistry International Conference 2016, Bangkok International Trade & Exhibition Centre, Bangkok (Thailand), January 2016.

B-6) 受賞, 表彰

奥村久士, 分子シミュレーション研究会学術賞 (2014).

伊藤 暁, 平成25年度日本生物物理学会中部支部講演会優秀発表者賞 (2014).

伊藤 暁, 新学術領域研究「動的秩序と機能」第3回国際シンポジウムポスター発表賞 (2015).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域12運営委員 (2015–2016).

日本生物物理学会中部支部会幹事 (2013–2015).

分子シミュレーション研究会幹事 (2011–2014).

学会の組織委員等

分子シミュレーションスクール実行委員 (2011–2016).

自然科学における階層と全体シンポジウム実行委員 (2012–2016).

学会誌編集委員

分子シミュレーション研究会会誌「アンサンブル」, 編集委員 (2004–2006).

その他

次世代スパコン戦略プログラム「計算物質科学イニシアティブ」第3部会研究担当者 (2010–), 広報小委員会委員 (2010–2014).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「生体分子シミュレーション入門」, 2016年12月13日.

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンターオリオン公募研究, 「アミロイド線維における動秩序形成機構を解明し阻害法を開発する計算分子科学」, 奥村久士 (2016年度–2018年度).

科研費新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」(公募研究), 「アミロイド線維の動的秩序形成過程の全貌の理論的解明」, 奥村久士 (2016年度–2017年度).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「シミュレーションと実験の連携によるアミロイド線維形成の機構解明」, 奥村久士 (2015年度).

科研費新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」(公募研究), 「親水性／疎水性溶液界面でのアミロイドベータペプチド凝集機構の理論的研究」, 奥村久士 (2014年度–2015年度).

自然科学研究機構岡崎統合バイオサイエンスセンターオリオン公募研究, 「アミノ酸・タンパク質・タンパク質複合体の階層をつなぐ計算分子科学：アミロイド線維形成を理解するために」, 奥村久士 (2013年度–2015年度).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「天文学と連携した分子動力学シミュレーションのための新しい数値積分法の開発」, 奥村久士 (2012年度).

科研費若手研究(B), 「計算機シミュレーションで探るアミロイドベータペプチドの多量体形成過程」, 伊藤 暁 (2012年度–2014年度).

科研費若手研究(B),「新しい分子動力学シミュレーション手法の開発とタンパク質折りたたみ問題への応用」,奥村久士(2011年度-2014年度).

科研費若手研究(B),「ナノスケールの非定常流を記述する流体力学の統計力学的検証」,奥村久士(2005年度-2007年度).

C) 研究活動の課題と展望

- a) これまで親水性／疎水性溶液界面でアミロイド β ペプチド1本のシミュレーションを行ってきた。今後この界面で複数本のアミロイド β ペプチドがダイナミックに離合集散する過程のシミュレーションを行う。そして、アミロイド β ペプチドが自律的に集合するメカニズムを理論的に解明する。
- b) A β ペプチドの凝集が金属イオンにより加速される理由を調べるため、水中に複数本のA β ペプチドと金属イオンが存在する系のシミュレーションを行う。ここでは今年度我々が開発した高速なQM/MM 計算手法を用いる。A β ペプチドと金属イオンの間で配位結合が形成されるか否か、形成されるとすればどの残基との間で形成されるのか明らかにし、金属イオンによるA β ペプチドの凝集加速機構を解明する。
- c) アミロイド線維の生成はバラバラのモノマー状態から核生成過程を経て、アミロイド線維が伸長し平衡状態に至る。しかし、これまでのシミュレーション研究ではこの全過程を調べた研究はない。そこで比較的凝集しやすい短いペプチドについて100本以上のモノマーから核生成過程、伸長過程を経てアミロイド線維が形成される過程の全貌を全原子分子動力学シミュレーションで明らかにする。このシミュレーションによりペプチドが自律的に集合する物理化学的メカニズムを解明する。

理論・計算分子科学研究部門

藤 田 貴 敏（特任准教授（若手独立フェロー））（2016 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：理論化学，計算物質科学

A-2) 研究課題：

- a) 有機半導体の励起子ダイナミクスの理論研究
- b) π 共役分子集合体の構造－機能相関の理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機半導体の光物性を考えるうえで，励起子の形成や拡散を考えるのは重要である。我々は電子状態理論や量子動力学法を組み合わせることにより，有機半導体中の励起子ダイナミクスを取り扱える方法を開発した。本研究で p 型有機半導体薄膜の励起子ダイナミクスを解析した結果，有機半導体の光物性が従来考えられてきたフレンケル励起子モデルでは説明つかないこと，光励起後にフレンケル型励起子と電荷移動型励起子が混合した状態が生成することを見出だした。
- b) 有機分子を使った機能性材料を設計する試みが行われており，様々の π 共役分子系の合成が行われている。本研究ではピロール環を持つ π 電子系分子結晶多形に着目し， π - π スタッキング構造と電荷移動度の関係について理論研究を行った。3 種の結晶構造について電子状態計算と電荷移動理論を用いた解析を行った。3 種の結晶はいずれもヘリンボーン状の結晶構造を持つにもかかわらず，スタッキング様式の違いにより電荷移動の次元性や異方性が変化することが分かった。

B-1) 学術論文

T. FUJITA, S. ATAHAN-EVRENK, N. P. D. SAWAYA and A. ASPURU-GUZZI, “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).

B-4) 招待講演

藤田貴敏, 「励起子の計算物理化学——分子集合体の光物性と励起ダイナミクス——」, 第 248 回自然環境論セミナー, 神戸大学, 神戸 (日本), 2016 年 3 月.

藤田貴敏, 「分子集合体の光物性と励起子についての理論研究」, 第 59 回量子物理化学セミナー, 横浜市立大学, 横浜 (日本), 2016 年 7 月.

藤田貴敏, 「低分子有機半導体の光物性と励起子ダイナミクス」, 日本物理学会秋季大会シンポジウム, 金沢大学, 金沢 (日本), 2016 年 9 月.

T. FUJITA, “Exciton Dynamics in DNTT Thin Films,” EMN Meeting on Theory and Computation, South Point Hotel, Las Vegas (U.S.A.), October 2016.

T. FUJITA, “Theoretical characterization of energy transport in the chlorosome light-harvesting antenna from green sulfur bacteria,” The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Commodore Hotel, Gyeongju (Korea), November 2016.

T. FUJITA, “Dynamics of Frenkel and Charge Transfer Excitons in DNTT Thin Films,” The 4th Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Soochow University, Suzhou (China), December 2016.

C) 研究活動の課題と展望

今後は有機半導体のpn接合やイオンペア分子集合体などのより複雑な系に展開したい。より複雑な系を扱う上では電子状態理論を高精度化する必要があり、特に軌道エネルギー・励起エネルギーの差や電子カップリングをより正確に計算する必要がある。フラグメント分子軌道をベースにしたカップリング計算の開発を進めており、全電子計算から準粒子の有効ハミルトニアンを導出する手法を検討中である。

岡 崎 圭 一（特任准教授（若手独立フェロー））（2016 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：理論生物物理学

A-2) 研究課題：

- a) 生体分子モーター F_1 -ATPase の動作メカニズムの解明
- b) 一分子実験時系列データの解析手法の開発と糖鎖分解型モーターへの応用
- c) タンパク質が引き起こす大規模生体膜変形メカニズムの解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ATP 合成酵素は、バクテリアからヒトまで、あらゆる生物の生命活動に必須なエネルギー源 ATP を合成する酵素である。その ATP 合成酵素において、ATP を合成する酵素部位をなすのが F_1 -ATPase である。 F_1 -ATPase 自体は、逆反応である ATP 加水分解エネルギーを用いて、回転軸を逆方向に回転させるモーターである。多くの一分子実験や結晶構造解析によりその化学力学共役メカニズムが明らかになってきたが、まだわからないこともある。その一つが、我々が以前取り組んだ ATP 加水分解後のリン酸解離のタイミングである。我々は、全原子分子動力学シミュレーションを用いて、リン酸解離が ADP 解離より後に起こることを示した。また、そのリン酸解離が回転力を生み出す原子レベルのメカニズムを明らかにした。もう一つの課題は、一分子実験で特定された状態（ATP 結合待ち状態、加水分解待ち状態）と原子レベルの構造との対応付けである。これについて、実験家と共同で、一分子 FRET 実験と F_1 -ATPase 結晶構造の主成分解析などから、今までよくわかっていなかった ATP 結合待ち状態の構造状態について新たな情報を得ることができた。さらに、この情報を生かして、全原子シミュレーションからその原子レベルの構造を同定しようとしているところである。
- b) 生体分子モーターが機能する際には、時間・空間的にマルチスケールなダイナミクスが関わっている。異なる時間・空間分解能を持つ手法である一分子実験と分子シミュレーションは、その動作メカニズムの解明においてそれぞれの強みがある。しかしながら、これらの手法から得られる結果には往々にしてギャップがあり、動作メカニズムの全貌の解明には至らないことが多い。このギャップを埋めるために、一分子実験時系列データの解析から、その背後にある状態・エネルギー地形などを推定する一般的な方法論を開発する。そして、今まで検出困難であった動作サイクル中の中間状態などを同定し、分子シミュレーションによる原子レベルのメカニズムと直接結びつけることを目指す。糖鎖分解型モーターを例にとって方法論の開発中である。
- c) 細胞中で生体膜は様々な形状をしている。ミトコンドリアのクリステやゴルジ体など様々な形状・曲率を持った構造が見られるが、その形成メカニズムは必ずしも良くわかっていない。このマイクロメートルスケールの大規模生体膜変形メカニズムを粗視化モデルによるシミュレーションで明らかにする。特に、タンパク質が引き起こす膜変形に注目して、タンパク質の効果を粗視化モデルに取り入れているところである。

B-1) 学術論文

M. SUGAWA, K. OKAZAKI, M. KOBAYASHI, T. MATSUI, G. HUMMER, T. MASAIKE and T. NISHIZAKA,
“ F_1 -ATPase Conformational Cycle from Simultaneous Single-Molecule FRET and Rotation Measurements,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **113**, E2916–E2924 (2016).

B-4) 招待講演

K. OKAZAKI, “Mechanochemical Coupling, Elasticity and Friction of F_1 -ATPase,” The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Science, Gyeongju (Korea), November 2016.

K. OKAZAKI, “Conformational Cycle, Elasticity and Friction of F_1 -ATPase,” The Tokyo Molecular Motor Show, 学習院大学, 東京, 2016年9月.

K. OKAZAKI, “Conformational Dynamics, Mechanochemical Coupling, and Viscoelasticity of F_0F_1 ATP synthase,” 野地研究室セミナー, 東京大学工学系研究科, 東京, 2016年8月.

B-6) 受賞, 表彰

岡崎圭一, 日本生物物理学会若手奨励賞 (2014).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

第10回分子シミュレーションスクール世話人 (2016).

学会の組織委員等

日本生物物理学会運営委員 (2010–2011).

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構融合発展促進研究プロジェクト, 「ベイズ推定を用いた生体分子モーターの動作メカニズムの解明: 一分子実験と分子シミュレーションの橋渡し」, 岡崎圭一 (2016年–2018年).

日本学術振興会海外特別研究員, 「生体分子モーターにおけるアロステリック遷移の自由エネルギー計算」, 岡崎圭一 (2012年–2014年).

日本学術振興会特別研究員 (PD), 「分子モーターの動作機構のマルチスケールな解析: 全原子・粗視化シミュレーション」, 岡崎圭一 (2009年–2012年).

日本学術振興会海外特別研究員 (DC 2), 「多谷エネルギー地形モデルによるタンパク質の構造変化機構のシミュレーション研究」, 岡崎圭一 (2007年–2009年).

C) 研究活動の課題と展望

2016年6月に着任して以来, 生体分子マシンの機能ダイナミクスを理論的な手法で解明して, そのデザイン原理を探索する研究を進めている。単一の生体分子モーターの原子レベルのダイナミクスから, タンパク質の集合体が引き起こすマイクロメートルスケールの大規模生体膜変形まで, 幅広いスケールの現象を全原子・粗視化シミュレーションや統計力学的モデリングを駆使して明らかにしていく。

6-3 光分子科学研究領域

光分子科学第一研究部門

岡 本 裕 巳（教授）（2000 年 11 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：ナノ光物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 先端的な近接場分光法の開発とその利用研究
- b) 金属ナノ構造におけるプラズモン波，増強電場のイメージングとダイナミクス
- c) ナノ構造物質におけるキラリティと局所的な光学活性
- d) 光によるナノ物質の力学操作手法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ナノ構造物質の観察と，特徴的な光学的性質，励起状態の超高速ダイナミクス等を探るための，近接場分光イメージング装置の開発を行い，並行して試料の測定を行っている。着任後測定装置の構築に取り組み，基本的なシステムの完成後プラズモン物質を中心にナノ光学の研究に用いてきた。光学像の横方向分解能は 50 nm 程度である。現在これを主に二つの方向に展開している。極めて短寿命のプラズモンの動的過程を直接観測する目的で超高速近接場計測を行うため，超短レーザーパルスと空間位相変調による分散補償を導入した装置を開発し，近接場で最短約 14 fs のパルス幅を実現した。これによりプラズモンの時空間ダイナミクスの観測に成功した。また近接場円二色性イメージングの装置を開発し，2次元金属ナノ構造の局所光学活性の研究を行っている。
- b) 各種形状貴金属ナノ構造体の分光及びダイナミクスのイメージング計測を行っている。微粒子及び集合体の近接場分光測定により，プラズモンモードの波動関数の二乗振幅や微粒子周辺の増強電場のイメージが得られることを見だし，その展開を図った。電子線描画装置，フェムト秒広帯域波長可変光源等を導入し，体系的にナノ構造試料作製，光場の空間構造と分光特性の近接場測定を進めた。またプラズモンのダイナミクスを直接観測可能な超高速近接場計測系により，プラズモンの位相緩和のほか，複数のプラズモンモードを同時励起した後のプラズモン波束の運動を可視化した。これはナノ物質励起の時空間コヒーレント制御に向けた重要なステップに位置付けられる。
- c) 2次元のキラルな構造を持つ金ナノ構造体を電子線描画法で作成し，開発を進めている近接場局所偏光解析イメージング装置を用い，局所的な光学活性を測定している。局所的な円二色性信号が巨視的な円二色性信号に比べて極めて大きくなることを見出し，また局所的な強い光学活性がナノ構造内の遠隔的な電磁気学相互作用で現れていることが明らかになる等，幾つかの基礎的に重要な結果が得られている。また高い対称性を持つアキラルな金属ナノ長方形構造において，巨視的な光学活性は当然現れないが，局所的には強い光学活性を示しており，それを平均すると全体の光学活性がほぼ0となっていることを，円二色性イメージングによって明確に示した。これらの発展として，金属ナノ構造と分子とのキラルな光学的相互作用に関する研究を，英国との共同研究として開始した。また金属ナノ構造における局所的に強くねじれた光の特性を更に解明し制御するための実験法の開発も，継続して推進している。

- d) レーザー光を強く集光すると、その焦点に微粒子がトラップされる(光トラッピング)。この時入射光にフェムト秒レーザーパルスを用いることで、非線形誘起分極によって、従来の光トラッピングとは全く異なる挙動を示すことを、数年前に報告した。非線形効果、共鳴効果を有効利用することで、このような光による力学的マニピュレーションの自由度が格段に広がることが予想され、この研究展開を図ることを、今後の研究の今一つの柱とする。

B-1) 学術論文

T. NARUSHIMA, S. HASHIYADA and H. OKAMOTO, “Optical Activity Governed by Local Chiral Structures in Two-Dimensional Curved Metallic Nanostructures,” *Chirality* **28**, 540–544 (2016).

T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, “Circular Dichroism Microscopy Free from Commingling Linear Dichroism via Discretely Modulated Circular Polarization,” *Sci. Rep.* **6**, 35731 (2016).

Y. NISHIYAMA and H. OKAMOTO, “Near-Field Nonlinear CD Imaging of Single Gold Nanostructures,” *J. Phys. Chem. C* **120**, 28157–28162 (2016).

B-4) 招待講演

Y. NISHIYAMA, K. IMURA and H. OKAMOTO, “Spatio-Temporal Observation of Plasmon Dynamics by Ultrafast Near-Field Microscopy,” 9th Asian Conference on Ultrafast Phenomena, Manila (Philippines), February 2016.

T. NARUSHIMA, S. HASHIYADA and H. OKAMOTO, “Near-Field Circular Dichroism Imaging to Design Optically Active Nanomaterials,” 11th Annual IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems (IEEE-NEMS 2016), Matsushima (Japan), April 2016.

H. OKAMOTO, Y. NISHIYAMA and K. IMURA, “Observation of Plasmon Wave Packet Motions with Ultrafast Near-Field Microscopy,” 7th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META’16), Malaga (Spain), July 2016.

H. OKAMOTO, Y. JIANG and T. NARUSHIMA, “Effects of nonlinear polarization in optical trapping,” PIERS (Progress In Electromagnetics Research Symposium) 2016 in Shanghai, Shanghai (China), August 2016.

H. OKAMOTO, Y. NISHIYAMA, K. IMAEDA and K. IMURA, “Near-Field Optical Imaging of Ultrafast Dynamics in Gold Nanorods,” PIERS (Progress In Electromagnetics Research Symposium) 2016 in Shanghai, Shanghai (China), August 2016.

井村考平, 今枝佳祐, 溝端秀聡, 西山嘉男, 岡本裕巳, 「近接場顕微分光手法の拡張とプラズモン研究への応用」, 第77回応用物理学会秋季学術講演会, 新潟, 2016年9月.

H. OKAMOTO, “Near-Field Imaging of Plasmons: Field Structures, Propagation Dynamics, Chirality,” Optics & Photonics Japan 2016, OSJ-OSA Joint Symposia on Plasmonics and Digital Photonics, Tokyo (Japan), October 2016.

成島哲也, 「ナノマテリアルが示す光学活性の起源を探る: 円二色性ナノイメージング」, 第10回日本化学会東海支部若手研究者フォーラム～理論と実験から探る, マクロとミクロをつなぐケミストリー～, 名古屋, 2016年11月.

岡本裕巳, 「キラルプラズモンの局所的な光学活性」, 第4回豊田理研ワークショップ「キラル対称系の電磁応答」, 名古屋, 2016年11月.

B-5) 特許出願

特願 2015-257226, 「円偏光照射器, 分析装置及び顕微鏡」, 岡本裕巳, 成島哲也(自然科学研究機構), 2015年.

B-6) 受賞, 表彰

岡本裕巳, 光科学技術研究振興財団研究者表彰 (1994).
岡本裕巳, 分子科学研究奨励森野基金 (1999).
井村考平, 応用物理学会講演奨励賞 (2004).
井村考平, ナノオプティクス賞 (2005).
井村考平, 分子構造総合討論会奨励賞 (2005).
井村考平, 光科学技術研究振興財団研究者表彰 (2007).
井村考平, 日本化学会進歩賞 (2007).
井村考平, 日本分光学会賞(奨励賞) (2007).
原田洋介, ナノオプティクス賞 (2010).
岡本裕巳, 日本化学会学術賞 (2012).
成島哲也, Yamada Conference LXVI Best poster award (Young Scientist) (2012).
橋谷田俊, 日本光学会 OPJ ベストプレゼンテーション賞 (2013).
西山嘉男, 日本分光学会年次講演会一般講演賞 (2014).
橋谷田俊, 日本化学会第95春季年会学生講演賞 (2015).
橋谷田俊, 第9回分子科学討論会分子科学会優秀ポスター賞 (2015).
西山嘉男, The 3rd Optical Manipulation Conference Outstanding Award (2016).
橋谷田俊, The Best Poster Presentation Award, NFO-14 (2016).
橋谷田俊, OSJ-OSA Joint Symposia Student Award (2016).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等員

日本化学会トピックス小委員会委員 (1993–1996).
日本分光学会編集委員 (1993–2001).
日本分光学会東海支部幹事 (2001–2012).
日本化学会東海支部常任幹事 (2003–2005).
分子科学研究会事務局 (2004–2006).
分子科学会運営委員 (2006–2008).

学会の組織委員等

The International Symposium on New Developments in Ultrafast Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (Tokyo), Organizing Committee (1995).
The Tenth International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (Okazaki), Local Executive Committee (2001).
The Twentieth International Conference on Raman Spectroscopy (Yokohama), Local Organizing Committee (2006).
International Workshop on Soft X-ray Raman Spectroscopy and Related Phenomena (Okazaki), Local Organizing Committee (2006).
The 12th Korea-Japan Joint Symposium on Frontiers of Molecular Science (Jeju), Co-chair (2007).

Japan-Korea Joint Symposium on Molecular Science 2009 “Chemical Dynamics in Materials and Biological Molecular Sciences” (Awaji), Co-chair, Secretary general (2009).

The 7th Asia-Pacific Conference on Near-Field Optics (Jeju), Technical Program Committee (2009).

Yamada Conference LXVI: International Conference on the Nanostructure-Enhanced Photo-Energy Conversion, Programming Committee (2012).

1st Optical Manipulation Conference, Optics & Photonics International Congress 2014, Program Committee (2014).

2nd Optical Manipulation Conference, Optics & Photonics International Congress 2015, Program Committee (2015).

3rd Optical Manipulation Conference, Optics & Photonics International Congress 2016, Program Committee (2016).

The 14th International Conference on Near-Field Optics, Nanophotonics and Related Techniques, Local Organizing Committee (2016).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2006–2007).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2008–2010).

日本学術振興会国際事業委員会書面審査員 (2008–2010).

文部科学省研究振興局科学研究費補助金における評価に関する委員会 (理工系委員会) 委員 (評価者) (2010–2012).

日本学術振興会学術システム研究センター専門研究員 (2013–).

学術誌編集委員

Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews, Advisory Board (2012–).

その他

スーパーサイエンスハイスクール (愛知県立岡崎高等学校) 活動支援 (2003, 2004).

総合研究大学院大学物理科学研究科副研究科長 (2010–2012).

総合研究大学院大学物理科学研究科研究科長 (2012–2014).

分子科学研究所運営会議議長 (2014–).

自然科学研究機構教育研究評議員 (2016–).

B-8) 大学での講義, 客員

国立交通大学 (台湾), 「Micro- and nano-scopic optical activity measurements」, 2016年5月6日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「構造光科学」, 2016年7月5日–8日.

B-10) 競争的資金

科研費萌芽研究, 「近接場分光法による素励起の波動関数イメージング」, 岡本裕巳 (2005年–2007年).

科研費特定領域研究「極微構造反応」(公募研究), 「極微構造における素励起の時空間コヒーレンスの超高時間分解近接場分光」, 岡本裕巳 (2005年–2007年).

科研費基盤研究(A), 「ナノ微粒子系の波動関数と励起状態の動的挙動」, 岡本裕巳 (2006年–2010年).

池谷科学技術振興財団研究助成, 「固体表面・界面歪みの利用を目的とした2次元高精度歪み検出系開発」, 成島哲也 (2007年).

科研費特定領域研究「光–分子強結合場」(計画研究), 「近接場顕微分光に基づく光反応場の動的可視化・制御」, 岡本裕巳 (2007年–2011年).

科研費挑戦的萌芽研究,「ナノ円二色性イメージングの開発と分子集合体キラリティ」,岡本裕巳(2009年–2011年).
 科研費基盤研究(S),「ナノドット配列における結合励起状態の時空間特性と励起場制御」,岡本裕巳(2010年–2015年).
 科研費若手研究(B),「近接場光励起領域近傍の空間分解分光イメージング」,成島哲也(2011年–2014年).
 科研費特別研究員奨励費,「超高速時間分解分光法を用いたイオン液体中における光解離反応過程の解明」,西山嘉男(2011年–2012年).
 二国間交流事業共同研究(英国との共同研究),「ナノフォトニック物質の光電場構造・ダイナミクス解析」,岡本裕巳(2012年–2014年).
 科研費若手研究(B),「近接場超短パルスによるプラズモン波束のコヒーレント制御」,西山嘉男(2013年–2015年).
 光科学技術研究振興財団研究助成,「キラル物質に都合の良い光電場の発生とその相互作用に関する研究」,成島哲也(2013年–2015年).
 科研費基盤研究(C),「局所的に発現するナノ構造の強い光学活性の実態解明と物質系との相互作用への展開」,成島哲也(2014年–).
 科学技術振興機構さきがけ研究,「強い局所光学活性を利用したキラル光デバイス」,成島哲也(2014年–).
 科研費基盤研究(A),「キラルなプラズモン励起による不斉光化学場の展開」,岡本裕巳(2015年–).
 科研費挑戦的萌芽研究,「金属ナノ構造に誘起される局所的円偏光電場による磁性体中の磁化制御」,岡本裕巳(2015年–).
 科研費特別研究員奨励費,「金ナノ構造体の強い局所光学活性によるキラル光化学反応場の開拓」,橋谷田俊(2015年–).
 科研費特定領域研究(計画研究),「光圧を創る:物質自由度を活用した捜査の高度化」,岡本裕巳(2016年–).

C) 研究活動の課題と展望

近接場分光イメージングによる研究を推進し,金属ナノ構造体に関して波動関数や光電場の空間分布をイメージするという独自の研究領域を拓く事ができた。金属ナノ構造による光の局在化や増強などの性質・機能に関する新たな情報と方法論を提供し,多くの追随研究を生んだと考えている。並行して測定波長域の拡大や,試料設計・作製のための新装置導入,近接場計測装置の高度化等を行い,研究を次のフェーズに進めてきた。時間分解近接場分光では,10 fs レベルの時間分解能で近接場測定を実現し,金属ナノ構造の多モードコヒーレント励起後の時空間ダイナミクスのイメージングが可能となるなど,一つの山を越える段階に到達したと考えている。これを更に今後どのように展開するか,可能性を探ることが一つの課題であるが,非常に高度な技術を要する実験であり,困難も大きい。今一つのベクトルとして進めているナノ物質のキラリティの研究では,金属ナノ構造の光学活性イメージングによって,独自の実験的情報を得ることができた。対称性の高いアキラルな構造でも局所的に強い光学活性を示すという,ユニークな成果も得られた。近接場円二色性イメージングは今後様々なナノ構造光学活性物質の機能解明のための有力な実験手法になることを期待している。この実験手法で得られた成果をもとに,新たなキラル物質機能の研究へ展開することも,高いポテンシャルを持つものとして重点的に考えており,すでに国外との共同研究を開始している。また物質および光のキラリティは磁性との相関においても興味を持たれ,ナノ光学の観点からこの方向への研究展開についても検討を開始し,一部実際の共同研究も始めた。通常の回折光学系による顕微鏡で精度の高い円二色性イメージングを可能とする装置開発も行なっており,これは物質開発,生物科学,結晶学等の様々な分野の研究者から興味を持って頂いている。一方これらとは異なる研究課題として,微粒子の光トラッピングに関わる独自の新たな研究萌芽(非線形共鳴光トラッピング)を見出し数年前に発表した。時を前後して国内で光圧(散乱力,勾配力)に関する新たな展開が勃興し,関連する研究を行っている研究者が集まって,今般新学術領域研究を発足した。光圧によるナノ物質・分子の力学操作に関する新たな展開を図るべく,この研究領域にも注力していく計画である。

光分子科学第二研究部門

大 森 賢 治（教授）（2003 年 9 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：量子物理学，原子分子光物理学，量子情報科学，物理化学

A-2) 研究課題：

- a) アト秒精度のコヒーレント制御法の開発
- b) 量子論の検証実験
- c) コヒーレント分子メモリーの開発
- d) 分子ベースの量子情報科学
- e) 強レーザー場非線形過程の制御
- f) 超高速量子シミュレーターの開発
- g) バルク固体の極限コヒーレント制御

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) コヒーレント制御は，物質の波動関数の位相を操作する技術である。その応用は，量子コンピューティングや結合選択的な化学反応制御といった新たなテクノロジーの開発に密接に結び付いている。コヒーレント制御を実現するための有望な戦略の一つとして，物質の波動関数に波としての光の位相を転写する方法が考えられる。例えば，二原子分子に核の振動周期よりも短い光パルスを照射すると，「振動波束」と呼ばれる局在波が結合軸上を行ったり来たりするような状態を造り出す事ができる。波束の発生に際して，数フェムト秒からアト秒のサイクルで振動する光電場の位相は波束を構成する各々の振動固有状態の量子位相として分子内に保存されるので，光学サイクルを凌駕する精度で光の位相を操作すれば波束の量子位相を操作することができる。我々はこの考えに基づき，独自に開発したアト秒位相変調器（APM）を用いて，二つのフェムト秒レーザーパルス間の相対位相をアト秒精度で操作するとともに，このパルス対によって分子内に発生した二つの波束の相対位相を同様の精度で操作する事に成功した。さらに，これらの高度に制御された波束干渉の様子を，ピコメートルレベルの空間分解能とフェムト秒レベルの時間分解能で観測する事に成功した。
- b) APMを用いて，分子内の2個の波束の量子干渉を自在に制御する事に成功した。また，この高精度量子干渉をデコヒーレンス検出器として用いる事によって，熱的な分子集団や固体中の電子的なデコヒーレンスを実験的に検証した。さらに，固体パラ水素中の非局在化した量子状態（vibron）の干渉を観測し制御する事に成功した。
- c) 光子場の振幅情報を分子の振動固有状態の量子振幅として転写する量子メモリーの開発を行なった。ここでは，フェムト秒光パルス対によって分子内に生成した2個の波束間の量子位相差をアト秒精度で操作し，これらの干渉の結果生成した第3の波束を構成する各振動固有状態のポピュレーションを観測することによって，光子場の振幅情報が高精度で分子内に転写されていることを証明することができた。また，フェムト秒光パルス対の時間間隔をアト秒精度で変化させることによって波束内の固有状態のポピュレーションの比率を操作できることを実証した。さらに，固体パラ水素中の振動量子状態（vibron）の位相情報の2次元分布を操作し可視化することによって，固体2次元位相メモリーの可能性を実証することに成功した。
- d) 分子メモリーを量子コンピューターに発展させるためには，c)で行ったポピュレーション測定だけでなく，位相の測定を行う必要がある。そこで我々は，c)の第3の波束の時間発展を別のフェムト秒パルスを用いて実時間観測した。

これによって、ポピュレーション情報と位相情報の両方を分子に書き込んで保存し、読み出すことが可能であることを実証した。振動固有状態の組を量子ビットとして用いる量子コンピューターの可能性が示された。さらに、分子波束を用いた量子フーリエ変換を開発した。

- e) 分子の振動波束を構成する振動固有状態の振幅と位相を強レーザー場で制御することに成功した。
- f) 強相関・極低温リユードベリ原子集団の超高速・多体・電子ダイナミクスを、超短パルスレーザーで実時間観測し制御するための新しい実験手法を開発した。
- g) バルク固体中の原子の超高速2次元運動をフェムト秒単位で制御し画像化する新しい光技術を開発した。

B-1) 学術論文

N. TAKEI, C. SOMMER, C. GENES, G. PUPILLO, H. GOTO, K. KOYASU, H. CHIBA, M. WEIDEMÜLLER and K. OHMORI, “Direct Observation of Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in an Ultracold Rydberg Gas,” *Nat. Commun.* **7**, 13449 (2016).

C. SOMMER, G. PUPILLO, N. TAKEI, S. TAKEDA, A. TANAKA, K. OHMORI and C. GENES, “Time-Domain Ramsey Interferometry with Interacting Rydberg Atoms,” *Phys. Rev. A* **94**, 053607 (16 pages) (2016).

H. KATSUKI and K. OHMORI, “Simultaneous Manipulation and Observation of Multiple Ro-Vibrational Eigenstates in Solid Para-Hydrogen,” *J. Chem. Phys.* **145**, 124316 (9 pages) (2016).

B-3) 総説, 著書

大森賢治, 「アト秒精度のコヒーレント制御の開発と応用」, 月刊オプトロニクス 2016年10月号 (2016).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

K. OHMORI, “Many-Body Physics: The Holy Grail of Modern Sciences and Technologies,” State Key Laboratory of Quantum Optics and Quantum Optics Devices, Shanxi University, Taiyuan (China), November 2016.*

K. OHMORI, “Addressing Quantum Many-Body Dynamics by Ultrafast Coherent Control with Attosecond Precision,” CQD-IMS Collaborative Meeting “Rydberg Quantum Matter,” Heidelberg (Germany), June 2016.*

K. OHMORI, “Many-Body Physics: The Holy Grail of Modern Sciences and Technologies,” 1st International Symposium on Advanced Photonics (ISAP), Hamamatsu (Japan), April 2016.*

K. OHMORI, “Direct Observation and Control of Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly-Correlated Ultracold Rydberg Gas,” OIST Mini Symposium “Rydberg Atoms for Quantum Technologies,” Okinawa (Japan), March 2016.*

大森賢治, 「量子力学に残された100年の謎に迫る」, 浜松ホトニクス中央研究所, 浜松 (日本), 2016年7月.*

大森賢治, 「アト秒精度の超高速光量子シミュレーター: 超多体ダイナミクス専用プラットフォームの開発」, 計算分子科学研究拠点第6回研究会, 岡崎 (日本), 2016年3月.*

大森賢治, 「量子力学に残された100年の謎に迫る」, 日立中央研究所, 鳩山 (日本), 2016年1月.*

B-6) 受賞, 表彰

大森賢治, 独フンボルト賞 (2012).

大森賢治, アメリカ物理学会フェロー表彰 (2009).

大森賢治, 日本学士院学術奨励賞 (2007).
大森賢治, 日本学術振興会賞 (2007).
大森賢治, 光科学技術研究振興財団研究表彰 (1998).
大森賢治, 東北大学教育研究総合奨励金 (1995).
香月浩之, 英国王立化学会 PCCP 賞 (2009).
香月浩之, 光科学技術研究振興財団研究表彰 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学研究会委員 (2002–2006).
分子科学会設立検討委員 (2005–2006).
分子科学会運営委員 (2006–2007, 2010–2017).
原子衝突研究協会運営委員 (2006–2007).

学会の組織委員等

International Conference on Spectral Line Shapes 国際プログラム委員 (1998–).
21st International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions 準備委員, 組織委員 (1999).
The 5th East Asian Workshop on Chemical Reactions 組織委員長 (2001).
分子構造総合討論会実行委員 (1995).
第19回化学反応討論会実行委員 (2003).
原子・分子・光科学 (AMO) 討論会プログラム委員 (2003–).
APS March meeting; Focus Topic Symposium “Ultrafast and ultrahighfield chemistry” 組織委員 (2006).
APS March meeting satellite “Ultrafast chemistry and physics 2006” 組織委員 (2006).
第22回化学反応討論会実行委員 (2006).
8th Symposium on Extreme Photonics “Ultrafast Meets Ultracold” 組織委員長 (2009).
The 72nd Okazaki Conference on “Ultimate Control of Coherence” 組織委員 (2013).
A Peter Wall Colloquium Abroad and The 73rd Okazaki Conference on “Coherent and Incoherent Wave Packet Dynamics” 組織委員 (2013).
1st International Symposium on Advanced Photonics “Quantum Many-Body Science and Technology” 組織委員 (2016).

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・学術審議会量子科学技術委員会専門委員 (主査代理) (2015–).
日本学術振興会日仏先端科学シンポジウム PGM (2010–2012).
日本学術振興会 HOPE ミーティング事業委員 (2012–2016).
日本学術振興会日独学術コロキウム学術幹事 (2013–2014).
European Research Council (ERC), Invited Panel Evaluator.
European Research Council (ERC), Invited Expert Referee.

学会誌編集委員

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, International Advisory Board (2015–).

その他

平成16年度安城市シルバーカレッジ「原子のさざ波と不思議な量子の世界」。

岡崎市立小豆坂小学校 第17回・親子おもしろ科学教室「波と粒の話」。

立花隆+自然科学研究機構シンポジウム 爆発する光科学の世界——量子から生命体まで——「量子のさざ波を光で制御する」。

B-8) 大学での講義, 客員

University of Heidelberg, 客員教授, 2012年–。

University of Strasbourg, 客員教授, 2014年–2016年。

B-10) 競争的資金

科研費特別推進研究, 「アト秒精度の超高速コヒーレント制御を用いた量子多体ダイナミクスの探求」, 大森賢治 (2016年–2021年)。

科学技術振興機構CREST 研究, 「アト秒精度の凝縮系コヒーレント制御」, 大森賢治 (2010年–2016年)。

科研費基盤研究(A), 「アト秒ピコメートル精度の時空間コヒーレント制御法を用いた量子／古典境界の探索」, 大森賢治 (2009年–2011年)。

科研費特別研究員奨励費, 「非線形波束干渉法の開発とデコヒーレンスシミュレーターへの応用」, 大森賢治 (2009年–2010年)。

科研費特別研究員奨励費, 「極低温原子分子の超高速コヒーレント制御」, 大森賢治 (2008年–2010年)。

科研費基盤研究(B), 「遺伝アルゴリズムを用いたデコヒーレンスの検証と制御法の開発」, 大森賢治 (2006年–2007年)。

科研費基盤研究(A), 「サブ 10 アト秒精度の量子位相操作と単一分子量子コンピューティング」, 大森賢治 (2003年–2005年)。

科研費特定領域研究(2) 「強レーザー光子場における分子制御」計画班, 「単一原子分子のアト秒コヒーレント制御」, 大森賢治 (2003年–2005年)。

C) 研究活動の課題と展望

今後我々の研究グループでは, APM を高感度のデコヒーレンス検出器として量子論の基礎的な検証に用いると共に, より自由度の高い量子位相操作技術への発展を試みる。そしてそれらを希薄な原子分子集団や凝縮相に適用することによって, 「アト秒量子エンジニアリング」と呼ばれる新しい領域の開拓を目指している。当面は以下の4テーマの実現に向けて研究を進めている。

- ① デコヒーレンスの検証と抑制: デコヒーレンスは, 物質の波としての性質が失われて行く過程である。量子論における観測問題と関連し得る基礎的に重要なテーマであるとともに, テクノロジーの観点からは, 反応制御や量子情報処理のエラーを引き起こす主要な要因である。その本質に迫り, 制御法を探索する。
- ② 量子散逸系でのコヒーレント制御の実現: ①で得られる知見をもとにデコヒーレンスの激しい凝縮系でのコヒーレント制御法を探索する。
- ③ 分子ベースの量子情報科学の開拓: 高精度の量子位相操作によって分子内の振動固有状態を用いるユニタリ変換とそれに基づく量子情報処理の実現を目指す。さらに, 単一分子の操作を目指して, 冷却分子の生成を試みる。
- ④ レーザー冷却された原子集団のコヒーレント制御: レーザー冷却された原子集団への振幅位相情報の書き込みとその時間発

展の観測・制御。さらに極低温分子の生成とコヒーレント制御。これらを通じて、多体量子問題のシミュレーション実験、量子情報処理、極低温化学反応の観測と制御を目指す。

これらの研究の途上で量子論を深く理解するための何らかのヒントが得られるかもしれない。その理解はテクノロジーの発展を促すだろう。我々が考えている「アト秒量子エンジニアリング」とは、量子論の検証とそのテクノロジー応用の両方を含む概念である。

光分子科学第三研究部門

小 杉 信 博（教授）（1993 年 1 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：軟X線光化学，光物性

A-2) 研究課題：

- a) 軟X線吸収分光法，光電子分光法による分子間相互作用の研究
- b) 内殻励起の理論アプローチの開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 軟X線吸収分光法，光電子分光法による分子間相互作用の研究：本グループでは内殻励起・光電子スペクトルを 1–10 meV オーダーで精密かつ系統的に観測することで，励起・イオン化した原子周辺の局所的な分子間相互作用の様子が明らかにできることを示してきた。特に最近，その場観測用軟X線吸収試料セルを開発することによって，混合液体や固液界面反応系にも研究対象を拡大している。さらに，集光軟X線ビームと組み合わせることで，ナノスケール化学状態マッピングの開拓的研究に取り組んでいる。例えば，溶液（二成分液体）の溶質の周りの局所的な配位構造や電子構造を解明することに成功している。電極反応や触媒反応のその場観測やこれまでバンド形成が見つからなかったような弱い分子間相互作用によるバンド分散の観測等にも成功している。
- b) 内殻励起の理論アプローチの開発：本グループで独自開発している軟X線内殻スペクトルの量子化学計算コード GSCF3 は世界の放射光施設（スウェーデン MAX, 米 ALS, 独 BESSY, カナダ CLS, 仏 SOLEIL, 伊 ELETTRA など）の実験研究者によって簡単な分子から高分子などの大きな分子まで 10 年以上前から活用されている。最近，内殻励起の実験研究が進み，多電子励起，スピン軌道相互作用，円偏光度などの新たな測定結果に対しても理論解析が要求されるようになった。そのため，新たに内殻励起計算用量子化学 CI コード GSCF4 の開発・整備を進めている。

B-1) 学術論文

- T. FRANSSON, Y. HARADA, N. KOSUGI, N. A. BESLEY, B. WINTER, J. J. REHR, L. G. M. PETTERSSON and A. NILSSON**, “X-Ray and Electron Spectroscopy of Water,” *Chem. Rev.* **116**, 7551–7569 (2016).
- T. BRANDENBURG, R. GOLNAK, M. NAGASAKA, K. ATAK, S. S. N. LALITHAMBIKA, N. KOSUGI and E. F. AZIZ**, “Impacts of Conformational Geometries in Fluorinated Alkanes,” *Sci. Rep.* **6**, 31382 (7 pages) (2016).
- M. W. LIN, K. C. WANG, J. H. WANG, M. H. LI, Y. L. LAI, T. OHIGASHI, N. KOSUGI, P. CHEN, D. H. WEI, T. F. GUO and Y. J. HSU**, “Improve Hole Collection by Interfacial Chemical Redox Reaction at a Mesoscopic NiO/CH₃NH₃PbI₃ Heterojunction for Efficient Photovoltaic Cells,” *Adv. Mater. Interfaces* **3**, 1600135 (12 pages) (2016).
- H. YAMANE and N. KOSUGI**, “Site-Specific Organic/Metal Interaction Revealed from Shockley-Type Interface State,” *J. Phys. Chem. C* **120**, 24307–24313 (2016).
- K. YAMAMOTO, A. KLOSSEK, R. FLESCH, T. OHIGASHI, E. FLEIGE, F. RANCAN, J. FROMBACH, A. VOGT, U. BLUME-PEYTAU, P. SCHRADER, S. BACHMANN, R. HAAG, S. HEDTRICH, M. SCHÄFER-KORTING, N. KOSUGI and E. RÜHL**, “Core-Multishell Nanocarriers: Transport and Release of Dexamethasone Probed by Soft X-Ray Spectromicroscopy,” *J. Controlled Release* **242**, 64–70 (2016).

B-3) 総説, 著書

長坂将成, 小杉信博, 「軟X線透過吸収法: 分子間相互作用解析のための化学シフトと測定技術」, *J. Vac. Soc. Jpn.* **59**(11), 301–306 (2016).

大東琢治, 小杉信博, 「UVSOR-III の走査型透過X線顕微鏡における化学状態分析法の開発」, *放射光学会誌* **19**(6), 287–293 (2016).

B-4) 招待講演

小杉信博, 「分子の内殻励起に関する先導的実験及び理論 (第68回日本化学会賞受賞講演)」, 日本化学会春季年会, 京田辺, 2016年3月.

N. KOSUGI, “Chemical Shifts in Inner-shell Excitations arising from Molecular Interactions,” International Conference on The Future of X-Ray and Electron Spectroscopies (XRAY-2016), Uppsala (Sweden), June 2016.

N. KOSUGI, “Optimal Energy and Spatial Resolutions for in situ/operando Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” 2nd International Workshop on Soft X-Ray Science Opportunities using Diffraction-limited Storage Rings, organized by NSRL and ALS, Hefei (China), August 2016.

H. YAMANE, “Valence-Band Dispersion in Organic Thin Films and Interfaces,” Okazaki Conference “Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA),” Okazaki, November 2016.

B-6) 受賞, 表彰

小杉信博, 第68回日本化学会賞 (2016).

初井宇記, 日本放射光学会奨励賞 (2006).

山根宏之, 日本放射光学会奨励賞 (2009).

長坂将成, 日本放射光学会奨励賞 (2013).

山根宏之, 分子科学会奨励賞 (2014).

小杉信博, 分子科学研究奨励森野基金研究助成 (1987).

長坂将成, 分子科学研究奨励森野基金研究助成 (2016).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会評議員 (1994–1995, 1998–1999, 2002–2003, 2006–2007, 2009–2010, 2012–2013, 2015–2017), 庶務幹事 (1994), 特別委員会委員 (将来計画 2001–2003, 先端のリング型光源計画 2005–2006, 放射光光源計画 2009–2011).

日本化学会化学技術賞等選考委員会委員 (2001–2002), 学術賞・進歩賞選考委員会委員 (2014–2015), 学会賞選考委員会委員 (2016).

学会の組織委員等

SRI シンクロトン放射装置技術国際会議国際諮問委員 (1994–2009, 2014–).

VUV 真空紫外光物理国際会議国際諮問委員 (2004–2008).

X線物理及び内殻過程の国際会議国際諮問委員 (2006–2008).

VUVX 真空紫外光物理及びX線物理国際会議国際諮問委員 (2008–2013).

ICESS 電子分光及び電子構造国際会議国際諮問会議委員 (2006–), 副議長 (2015–).

VUV-12, VUV-14 真空紫外光物理国際会議プログラム委員 (1998, 2004).

ICESS-11 電子分光及び電子構造国際会議共同議長, 国際プログラム委員長 (2009).

ICESS-8,9,10,12 電子分光及び電子構造国際会議国際プログラム委員 (2000, 2003, 2006, 2012).

IWP 光イオン化国際ワークショップ国際諮問委員・プログラム委員 (1997, 2000, 2002, 2005, 2008, 2011).

DyNano2010 短波長放射光によるナノ構造及びダイナミクス国際ワークショップ諮問委員 (2010, 2011).

SXET 軟X線周波数領域及び時間領域に関する国際ワークショップ共同議長 (2015).

台湾軟X線散乱国際ワークショップ組織委員 (2009).

COREDEC 内殻励起における脱励起過程国際会議プログラム委員 (2001).

ICORS2006 第20回国際ラマン分光学会議プログラム委員 (2006).

IWSXR 軟X線ラマン分光及び関連現象に関する国際ワークショップ組織委員長 (2006).

XAFS X線吸収微細構造国際会議実行委員 (1992), 組織委員 (2000), プログラム委員 (1992, 2000), 国際諮問委員 (2003).

ICFA-24 次世代光源に関する先導的ビームダイナミクス国際ワークショップ組織委員 (2002).

日仏自由電子レーザーワークショップ副議長 (2002).

日独セミナー Present State and Perspectives of Accelerator-based Photon Sources 日本側代表 (2013).

ASOMEA-VIII 有機電子材料のための先端分光国際ワークショップ組織委員 (2016).

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・学術審議会専門委員 (研究計画・評価分科会) (2005–2007).

文部科学省科学技術・学術審議会先端研究基盤部会量子ビーム利用推進小委員会委員, 主査代理 (2016).

文部科学省放射光施設の連携・協力に関する連絡会議作業部会委員 (2007–2008).

文部科学省大学共同利用機関法人準備委員会自然科学研究機構検討委員 (2003–2004).

日本学術振興会国際科学協力事業委員会委員 (2002–2003), 科学研究費委員会専門委員 (2007–2008, 2012, 2016), 特別研究員等審査会専門委員 (2009–2010), 特別研究員等審査会審査員 (2014–2015), 国際事業委員会書面審査員 (2009–2010, 2014–2015).

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 (さきがけ) 領域アドバイザー (2008–2014).

大学共同利用機関法人自然科学研究機構教育研究評議員 (2004–2006, 2010–2016).

高エネルギー加速器研究機構運営協議委員会委員 (2001–2003), 物質構造科学研究所運営協議委員会委員 (2001–2003), 加速器・共通研究施設協議会委員 (2001–2003), 物質構造科学研究所運営会議委員 (2015–).

東京大学物性研究所軌道放射物性研究施設運営委員会委員 (1994–2012, 2014–).

日本学術会議放射光科学小委員会委員 (2003–2005).

学会誌編集委員

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Editorial Board member (2005–2006), Editor (2007–).

その他

アジア交流放射光国際フォーラム組織委員及び実行委員 (1994, 1995, 2001, 2004).

アジア・オセアニア放射光フォーラム AOFSRR 国際諮問委員及びプログラム委員 (2007, 2009).

極紫外・軟X線放射光源計画検討会議光源仕様レビュー委員会委員 (2001–2002).

SPring-8 評価委員会委員 (2002, 2003, 2004), 登録機関利用活動評価委員会委員 (2008), 専用施設審査委員会委員 (2007–2010), パートナーユーザー審査委員会 (2013–2014).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験審査委員 (1997–2001), 放射光研究施設評価分科会委員 (2001–2002), 放射光戦略ワーキンググループ会議委員 (2007–2009), 放射光科学国際諮問委員会電子物性分科会委員 (2008), ERL 総括委員会委員長 (2016).

核融合科学研究所外部評価委員会共同研究・連携研究専門部会委員 (2010–2011).

東北放射光施設計画推進室委員 (2013–2014), 第三者委員会委員 (2015), 国際評価委員会委員 (2016).

九州シンクロtron光研究センタービームライン評価委員会委員 (2016).

台湾放射光科学国際諮問委員会委員 (2008–2011).

台湾国立シンクロtron放射研究センター人事委員 (2015–2016).

台湾中央研究院研究計画審査委員 (2010–2012).

フィンランドOulu 大学物理学科教授選考外部専門委員 (2010).

フランスCNRS ANR 基盤研究審査員 (2010–2012).

フランスUPMC(Paris 6)/CNRS Multi-scale Integrative Chemistry (MiChem) プロジェクト外部審査委員 (2011, 2014).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「軟X線内殻分光による分子間相互作用系の局所電子構造研究」, 小杉信博 (2008年–2010年).

科研費基盤研究(A), 「軟X線分光による液体・溶液の局所電子構造解析法の確立」, 小杉信博 (2011年–2013年).

科研費基盤研究(A), 「軟X線内殻励起によるその場観測顕微分光法の確立と応用」, 小杉信博 (2014年–2016年).

科研費若手研究(B), 「表面共吸着系の電子状態の同時観測法の開発と電極反応への展開」, 長坂将成 (2009年–2010年).

科研費若手研究(A), 「軟X線吸収分光法による電極固液界面の局所電子構造の解明」, 長坂将成 (2011年–2013年).

科研費基盤研究(C), 「マイクロ流路を用いた溶液反応の時間分解軟X線分光法の開発」, 長坂将成 (2016年–2018年).

科研費若手研究(B), 「内殻励起を利用した有機半導体薄膜・界面の局所電子状態と電荷輸送ダイナミクスの研究」, 山根宏之 (2009年–2010年).

科研費若手研究(A), 「分子間バンド分散の精密観測による有機半導体の電気伝導特性の定量的解明」, 山根宏之 (2012年–2014年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「動作環境における有機デバイス電子状態の「その場」観測」, 山根宏之 (2012年–2013年).

科研費若手研究(B), 「軟X線吸収分光法によるクロスカップリング反応中間体の直接検出」, 湯澤勇人 (2014年–2015年).

科研費特別研究員奨励費, 「軟X線吸収分光による固液界面構造の局所電子状態解析法の開発」, 湯澤勇人 (2014年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

本研究グループは, 光吸収分光と光電子分光に重点を置いて, 軟X線放射光の分子科学応用を展開している。UVSOR-I からUVSOR-II に高度化されたことで, 吸収エネルギーや光電子エネルギーのmeV オーダーシフトが観測できるようになり, 孤立分子や固体を対象とした研究から, クラスタ, 液体・溶液, 有機薄膜などの弱い分子間相互作用系の局所構造解析を可能とした。さらに, UVSOR-II からUVSOR-III に高度化されたことで, 輝度がさらに向上するとともに空間分解能が向上したので, これまでの均一系を対象とした基礎化学から不均一系の化学やバイオ系も対象として, 現在, 精力的にその場観測・オペランド観測や顕微分光を展開している。また, 緩やかな時間変化の追跡を組み合わせた実験も開始している。さらに, 内殻励起の化学シフトを高いエネルギー分解能と空間分解能で観測することによって初めて実現可能になる化学状態マッピングの手法開発に取り組んでいる。これらは放射光分子科学分野において国際的な競争力があり, 海外の他施設でも不可能なものも多く, 欧米の最先端軟X線高輝度光源施設と連携をとりながら相補的な国際共同に貢献している。今後も引き続き国際的な視野に立った特徴ある研究を国際連携しながらUVSOR-III 施設で進めていく。

解 良 聡（教授）（2014 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：表面物理学，有機薄膜物性

A-2) 研究課題：

- a) シンクロトロン放射光・レーザー光励起による弱相互作用系の電子状態計測
- b) 有機半導体薄膜の電荷輸送機構の研究
- c) 有機半導体薄膜の界面電子準位接合機構の研究
- d) 機能性分子薄膜の光電子放出強度の理論解析と分子軌道撮影法の開発
- e) 機能性分子薄膜の振動状態と電子励起計測
- f) 自己組織化と分子認識機能の分光研究
- g) 分子薄膜の作製と評価：成長ダイナミクス，構造と分子配向

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 機能性分子薄膜の弱相互作用による電子状態変化を計測する技術開発を進めている。弱相互作用を定量的に評価するため，蒸気圧の低い大型分子対応の気相光電子分光実験装置を開発し，分子集合による電子状態の違いに関する議論を進めている。2014 年度より新たに超短パルスレーザー光を励起源として電子状態を測定し，ホール緩和や励起子拡散など，電荷ダイナミクス関連の研究を開始した。
- b) 有機半導体のバンド分散関係：良質な配向有機結晶膜を作製し，価電子エネルギーバンド分散を測定し，分子間相互作用の大きさ，ホールの有効質量など，バンド伝導移動度を評価した。更に幾多の実験的困難の克服により，有機単結晶試料に対して行う技術を確立し，世界で初めて分散関係の検出に成功した。またパルス光源を用いた飛行時間型高分解能角度分解測定により，有機単結晶の二次元バンド分散関係の完全決定実験を進めている。
有機半導体の電荷振動結合：配向有機超薄膜の作製により，大型の分子薄膜系における光電子スペクトルの高エネルギー分解測定を実現する方法論を開拓して，分子薄膜における伝導ホールと分子振動の結合状態を初めて実測し，ホッピング移動度（そのポーラロン効果を含む）を分光学的に得る方法を開拓した。これらの物理量を実測することで，輸送機構の解明を目指している。
- c) 本質的には絶縁物である有機分子が n 型／p 型半導体として機能する起源を明らかにすべく研究を進めている。極めて高感度に光電子を捕捉し，評価可能な光電子分光装置を開発し，価電子バンドの 10 万分の 1 程度以下の微小バンドギャップ状態密度の検出に成功した。価電子帯トップバンドの状態密度分布がガウス型から指数関数型に変化し，基板フェルミ準位まで到達している様子をとらえた。ドナー・アクセプター半導体分子間の弱い vdW 結合から，分子と金属原子の局所的な強い化学結合によるギャップ準位形成までを統括検討し，エネルギー準位接合機構の解明を目指している。
- d) 高配向有機薄膜からの光電子放出強度の角度依存性について，多重散乱理論による強度解析を行い，分子薄膜構造の定量的解析を行うための方法論を検討している。多様な有機薄膜の分子配向に依存した電子波のポテンシャル散乱と干渉問題を評価してきた。また理論計算から，二次元角度分解測定により分子軌道の可視化が行え，配向分子系（固体）における分子計測の新たなツールとなりうることを提案した。放射光を利用した実験とともに，局在電子系における一電子近似の限界を検討し，弱相互作用系の物理を議論している。

- e) 低速電子エネルギー損失分光により、機能性分子薄膜の振動状態と電子励起状態を測定し、弱相互作用による振動構造への影響を調べている。
- f) 表面場で織り成すパイ共役分子系の超格子構造や、分子薄膜の自己組織化機構の解明を目指している。また超分子系の固相膜を作製し、自己組織化や原子・分子捕獲などによる電子状態への影響を測定することで、分子認識機能について分光学的に研究している。
- g) 有機分子薄膜(高分子薄膜)の電子状態を議論する上で、試料調整方法の確立が鍵である。光電子放射顕微鏡(PEEM)、走査プローブ顕微鏡(STM)、高分解能低速電子線回折(SPALEED)、準安定励起原子電子分光(MAES)、X線定在波法(XSW)、軟X線吸収分光(NEXAFS)等を用い、基板界面における単分子膜成長から結晶膜成長までの多様な集合状態について構造(分子配向)と成長を観察した。

B-1) 学術論文

T. HOSOKAI, A. HINDERHOFER, F. BUSSOLOTTI, K. YONEZAWA, C. LORCH, T. WATANABE, A. VOROBIEV, Y. HASEGAWA, Y. YAMADA, Y. KUBOZONO, A. GERLACH, S. KERA, F. SCHRIEBER and N. UENO, “Thickness and Substrate Dependent Thin Films Growth of Picene and Impact to the Electronic Structure,” *J. Phys. Chem. C* **119**, 29027–29037 (2015).

Y. NAKAYAMA, Y. URAGAMI, M. YAMAMOTO, K. YONEZAWA, K. MASE, S. KERA, H. ISHII and N. UENO, “High-Resolution Core-Level Photoemission Measurements on the Pentacene Single Crystal Surface Assisted by Photoconduction,” *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 094001 (8 pages) (2016).

J.-P. YANG, W.-Q. WANG, L.-W. CHENG, Y.-Q. LI, J.-X. TANG, S. KERA, N. UENO and X.-H. ZENG, “Mechanism for Doping Induced p Type C₆₀ Using Thermally Evaporated Molybdenum Trioxide (MoO₃) as a Dopant,” *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 185502 (6 pages) (2016).

T. KIRCHHUEBEL, M. GRUENEWALD, F. SOJKA, S. KERA, F. BUSSOLOTTI, T. UEBA, N. UENO, G. ROUILLE, R. FORKER and T. FRITZ, “Self-Assembly of Tetraphenyldibenzoperiflanthene (DBP) Films on Ag(111) in the Monolayer Regime,” *Langmuir* **32**, 1981–1987 (2016).

K. YONEZAWA, Y. SUDA, S. YANAGISAWA, T. HOSOKAI, K. KATO, T. YAMAGUCHI, H. YOSHIDA, N. UENO and S. KERA, “Charge Transfer States Appear in the π -Conjugated Pure Hydrocarbon Molecule on Cu(111),” *Appl. Phys. Express* **9**, 045201 (4 pages) (2016).

T. SCHULTZ, R. SCHLESINGER, J. NIEDERHAUSEN, F. HENNEBERGER, S. SADOFEV, S. BLUMSTENGEL, A. VOLLMER, F. BUSSOLOTTI, J.-P. YANG, S. KERA, K. PARVEZ, N. UENO, K. MÜLLEN and N. KOCH, “Tuning the Work Function of GaN with Organic Molecular Acceptors,” *Phys. Rev. B* **93**, 125309 (5 pages) (2016).

Y. HE, F. BUSSOLOTTI, Q. XIN, J. P. YANG, S. KERA, N. UENO and S. DUHM, “Transient Monolayer Structure of Rubrene on Graphite: Impact on Hole-Phonon Coupling,” *J. Phys. Chem. C* **120**, 14568–14574 (2016).

C. LI, J. WEI, M. SATO, H. KOIKE, Z.-Z. XIE, Y.-Q. LI, K. KANAI, S. KERA, N. UENO and J. X. TANG, “Halide-Substituted Electronic Properties of Organometal Halide Perovskite Films: Direct and Inverse Photoemission Studies,” *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8**, 11526–11531 (2016).

J. P. YANG, W. Q. WANG, F. BUSSOLOTTI, L. W. CHENG, Y. Q. LI, S. KERA, J. X. TANG, X. H. ZENG and N. UENO, “Quantitative Fermi Level Tuning in Amorphous Organic Semiconductor by Molecular Doping: Toward Full Understanding of the Doping Mechanism,” *Appl. Phys. Lett.* **109**, 093302 (4 pages) (2016).

T. UEBA, J. PARK, R. TERAOKA, Y. WATANABE, T. YAMADA and T. MUNAKATA, “Unoccupied Electronic Structure and Molecular Orientation of Rubrene; from Evaporated Films to Single Crystals,” *Surf. Sci.* **649**, 7–13 (2016).

T. UEBA, T. YAMADA and T. MUNAKATA, “Electronic Excitation and Relaxation Dynamics of the LUMO-Derived Level in Rubrene Thin Films on Graphite,” *J. Chem. Phys.* **145**, 214703 (9 pages) (2016).

B-4) 招待講演

S. KERA, “A perspective of quasiparticle state in organic crystals,” The 18th International conference on solid states and surfaces (ICSFS18), Chemnitz (Germany), August 2016.

S. KERA, “Deep insight into electronic states of functional molecular materials,” The International Conference on Electronic Materials (ICMRS-ICEM2016), Singapore, July 2016.

S. KERA, “Mass, momentum, and energy of an electron of rubrene single crystal,” The 4th Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Soochow (China), December 2016.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

UVSOR 利用者懇談会世話人 (2012–2014).

VUVX (International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-Ray Physics) 真空紫外光物理およびX線物理国際会議国際諮問委員 (2014–).

学会の組織委員等

第30回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム組織委員 (2016).

第77回応用物理学会秋季学術講演会プログラム編成委員 (2016).

第63回応用物理学会春季学術講演会プログラム編成委員 (2016).

The 4th Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Co-Chair (Soochow, China 2016).

学協会連携分子研研究会「表面科学の最先端技術と分子科学(第7回真空・表面科学若手研究会)」運営委員 (2016).

第76回岡崎コンファレンス “Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications” 主催者 (2016).

MPI-PKS 国際重点研究会 “Prospects and Limitations of Electronic Structure Imaging by Angle Resolved Photoelectron Spectroscopy,” Co-Chair (Dresden, Germany 2016).

JSPS-NSFC joint 3rd Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Chair (IMS, Okazaki 2015).

第29回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム組織委員 (2015).

第76回応用物理学会秋季学術講演会プログラム編成委員 (2015).

第62回応用物理学会春季学術講演会プログラム編成委員 (2015).

第28回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム組織委員 (2014).

JSPS-NSFC joint 2nd Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Co-chair (Soochow Univ., China 2014).

第75回応用物理学会秋季学術講演会プログラム編成委員 (2014).

第61回応用物理学会春季学術講演会プログラム編成委員 (2013).

第27回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2013).

JSPS-NSFC joint 1st Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Co-chair (Tokyo Univ. of Sci., Japan 2013).

UVSOR 研究会「UVSOR 有機固体専用ラインの今後の展開」主催者 (2012).

The 4th Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA4), Local Committee (Chiba, Japan 2007).

21世紀COE プログラム若手主導研究会主催者 (2006).

Workshop on Electrical and Electronic Properties in Crystalline Thin Films of Small-Molecules, Co-chair (Chiba, Japan 2005).

UVSOR 研究会「有機薄膜の放射光利用研究：BL8B2 の歩みと今後の展開」主催者 (2007).

学会誌編集委員

真空誌編集委員 (2008–2009).

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Guest Editor (2014).

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Editorial Board (2015–).

その他

千葉大学工学部工学同窓会部会幹事 (2008–2013).

B-8) 大学での講義, 客員

千葉大学大学院融合科学研究科, 連携客員教授, 2014年9月–.

千葉大学大学院融合科学研究科, 「ナノ創造物性工学特論II」, 2014年9月–.

蘇州大学, 客員教授, 2014年4月–.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(A), 「巨大分子吸着系における価電子帯ホール・振動結合：有機電荷輸送機構の解明」, 解良 聡 (2005年–2007年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「有機デバイス材料の個性を知る：移動度の直接評価」, 解良 聡 (2008年–2009年).

科研費若手研究(A), 「分子性固体における電荷輸送とその動的現象の解明」, 解良 聡 (2008年–2010年).

科研費基盤研究(B), 「パイ共役分子による低次元超格子ヘテロ界面構造とその電子状態」, 解良 聡 (2011年–2013年).

日本学術振興会二国間交流事業共同研究費 (NSFC), 「有機タンデム光電子デバイスの有機半導体の本性を活用した高性能化」, 解良 聡 (2013年–2015年).

科研費基盤研究(A), 「精密電子状態評価による有機半導体界面に特徴的な電子機能の解明」, 解良 聡 (2014年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

これまで積み重ねてきた大型の機能性分子の高配向薄膜試料を作製するノウハウを活用し, その電子状態を高分解能 (高感度) 光電子分光法により測定することで, 分子材料中の「電子の真の姿を見出すこと」を主眼として進めている。高感度紫外光電子分光装置, 気相光電子分光装置, 逆光電子分光装置, スポット分析型低速電子線回折装置の立ち上げを完了し,

実験データの取得を開始している。立ち上げ中のラボ装置としては新規に導入した超短パルスレーザー光源を用いたシステムが残るが、二光子光電子分光および時間分解光電子分光測定への実験展開を急ぎたい。UVSOR 施設においては、外部ユーザーとしてビームタイムの申請に努め、有機固体の未踏の電子状態測定を実現すべく、アドバンス光電子分光実験を推進している。X線定在波分光や飛行時間型角度分解光電子分光などの国内で実施不可能な先端分析実験は、引き続き海外放射光施設(Diamond (英), BESSY (独), ELETTRA (伊))の利用申請により共同利用実験を進める。UVSOR 施設利用実験の新規展開として、高運動量分解・高エネルギー分解光電子顕微鏡を用いた有機固体系の新奇実験装置開発について検討を開始した。実験データの理論解析を進めるために、国内外の理論グループとの連携を深める予定である。

光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

加 藤 政 博（教授）（2000 年 3 月 1 日着任，2004 年 1 月 1 日昇任）

A-1) 専門領域：加速器科学，放射光科学，ビーム物理学

A-2) 研究課題：

- a) シンクロトロン光源加速器の研究
- b) 自由電子レーザーの研究
- c) 相対論的電子ビームを用いた光発生法の研究
- d) 量子ビームの発生と応用に関する研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) シンクロトロン光源 UVSOR の性能向上に向けた開発研究を継続している。2000 年以降の断続的な加速器改良により，電子ビーム強度及び輝度の大幅な向上，電子ビーム強度を一定に保つトップアップ入射の導入などに成功し，低エネルギー放射光源としては世界最高水準の光源性能を実現した。高輝度放射光発生のために真空封止アンジュレータ 3 台，可変偏光型アンジュレータ 3 台を設計・建設し，稼働させた。
- b) 自由電子レーザーに関する研究を継続している。蓄積リング自由電子レーザーとして世界最高の出力を記録した。また，共振器型自由電子レーザーに関する基礎研究を進め，レーザー発振のダイナミクスやフィードバック制御に関する先駆的な成果を上げた。次世代の放射光源である回折限界リングや高繰り返し極紫外自由電子レーザーに関する基礎研究を進めた。
- c) 外部レーザーを用いて電子パルス上に微細な密度構造を形成することでコヒーレント放射光を極紫外領域やテラヘルツ領域において生成する研究を継続している。この手法により一様磁場中から準単色テラヘルツ放射光を発生することに世界に先駆けて成功した。電子パルス上に形成された密度構造の時間発展に関するビームダイナミクス研究により先駆的な成果を上げた。
- d) 外部レーザーと高エネルギー電子線を用いた逆コンプトン散乱によるエネルギー可変，偏光可変の極短ガンマ線パルス発生に関する研究を進めている。パルス幅数ピコ秒程度のガンマ線パルスの生成，エネルギー可変性の実証に成功した。光陰極を用いた電子源の開発を進めている。また，これら偏極量子ビームの応用研究の開拓を進めている。
- e) 高エネルギー電子ビームによる光渦の生成に成功し，その原理の解明に世界に先駆けて成功した。自然界での光渦の生成の可能性について，研究を進めると共に，深紫外・真空紫外領域での光渦の利用法の開拓を進めている。

B-1) 学術論文

H. ZEN, Y. TAIRA, T. KONOMI, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, J. YAMAZAKI, T. KII, H. TOYOKAWA, M. KATOH and H. OHGAKI, “Generation of High Energy Gamma-Ray by Laser Compton Scattering of 1.94- μm Fiber Laser in UVSOR-III Electron Storage Ring,” *Energy Procedia* **89**, 335–345 (2016).

E. TSUDA, Y. MITSUMOTO, K. TAKAKURA, N. SUNAGA, T. AKITSU, T. KONOMI and M. KATOH, “Electrochemical Tuning by Polarized UV Light Induced Molecular Orientation of Chiral Salen-Type Mn(II) and Co(II) Complexes in an Albumin Matrix,” *J. Chem. Chem. Eng.* **2**, 53–59 (2016).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

N. YAMAMOTO, X. G. JIN, K. YAMAGUCHI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA and M. KATOH, “Time Response Measurements for Transmission-Type GaAs/GaAsP Superlattice Photocathodes,” *Proc. 7th Internat. Particle Accel. Conf. (Busan, 2016)*, 2641 (2016).

M. HOSAKA, K. MIYAMOTO, S. SASAKI, K. KURODA, T. KONOMI, N. YAMAMOTO, N. S. MIRIAN and M. KATOH, “Experimental Study on Optical Vortex from A Helical Undulator at UVSOR-III,” *Proc. 7th Internat. Particle Accel. Conf. (Busan, 2016)*, 2036 (2016).

H. OHGAKI, T. KII, H. ZEN, I. DAITO, H. TOYOKAWA, Y. TAIRA, T. HAYAKAWA, T. SHIZUMA, M. KATOH and J. YAMAZAKI, “Study On NRF-CT Imaging by Laser Compton Backscattering Gamma-Rays in UVSOR,” *Proc. 7th Internat. Particle Accel. Conf. (Busan, 2016)*, 2007 (2016).

B-6) 受賞、表彰

島田美帆, 第8回日本加速器学会奨励賞 (2011).

平 義隆, 第7回日本物理学会若手奨励賞 (2012).

肥田洋平, 第9回日本加速器学会年会賞(ポスター部門) (2012).

丹羽貴弘, 第9回日本加速器学会年会賞(ポスター部門) (2012).

平 義隆, 第9回日本加速器学会年会賞(口頭発表部門) (2012).

梶浦陽平, 第10回日本加速器学会年会賞(ポスター部門) (2013).

稲垣利樹, 第11回日本加速器学会年会賞(ポスター部門) (2014).

伊藤圭也, 第12回日本加速器学会年会賞(ポスター部門) (2015).

宮内智寛, 第12回日本加速器学会年会賞(ポスター部門) (2015).

加藤政博, 第20回超伝導科学技術賞(未踏科学技術協会) (2016).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本加速器学会評議員 (2008–2009, 2013–).

日本放射光学会評議員 (2006–2009, 2010–2012, 2013–2015, 2016–).

学会の組織委員等

日本加速器学会組織委員 (2004–).

日本放射光学会第13回年会プログラム委員長 (2000).

日本加速器学会第10回年会プログラム委員長 (2013).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2000–2002).

B-8) 大学での講義、客員

高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設, 客員教授 2015年–.

名古屋大学シンクロtron光研究センター, 客員教授, 2006年–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「レーザーと電子ビームを用いたテラヘルツコヒーレント放射光の生成」,加藤政博(2005年–2007年).

科研費基盤研究(B),「電子ビームのレーザー微細加工によるコヒーレント光発生」,加藤政博(2008年–2010年).

文部科学省光・量子科学研究拠点形成に向けた基盤技術開発プロジェクト 量子ビーム基盤技術開発プログラム,高度化ビーム技術開発課題,「リング型光源とレーザーを用いた光発生とその応用」,加藤政博(2008年–2012年).

科研費基盤研究(B),「超狭帯域真空紫外コヒーレント放射光源の開発」,加藤政博(2011年–2013年).

科研費基盤研究(B),「シンクロトロン放射による真空紫外コヒーレント光渦ビームの発生」,加藤政博(2014年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR は2000年以降の高度化により,既に低エネルギーのシンクロトロン光源としては世界的にも最高レベルの性能に到達した。この光源性能を100%引き出すための安定性の向上に取り組んでいる。トップアップ運転時のビームの動きを最小限にするパルス六極磁石による入射効率の向上へ向けて研究を進めている。また,名古屋大学などと協力し,ビーム不安定性を抑制するための高調波空洞の開発を進める。

自由電子レーザーに関しては,共振器内逆コンプトン散乱による高効率単色ガンマ線生成などへの応用に向けた予備実験を進める。これらと並行して,レーザー発振のダイナミクスの基礎研究やシード光注入による発振の安定化や制御に関する研究を継続する。

極短パルスレーザーと蓄積リングの電子ビームを併用した,テラヘルツ領域でのコヒーレント放射の生成,真空紫外領域でのコヒーレント高調波発生の研究を進める。量子ビーム基盤技術開発プログラムのもと完成した新しい実験ステーションを用いて実用化に向けた技術開発を進める。特に光渦など従来の放射光にはない特異な性質を持つ光の基礎研究からその発生法の高度化,さらに利用法の開拓に取り組む。

新しい量子ビーム源として,レーザーと電子ビームの相互作用による極短パルスガンマ線の発生に関する研究を進める。偏光可変性や極短パルス特性を活かした利用法の開拓を行う。また,名古屋大学などと協力し,スピン偏極電子源の開発を進める。生体物質への照射や逆光電子分光などへの展開を図る。

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

田 中 清 尚（准教授）（2014 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：物性物理学，放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) 高温超伝導体の電子状態の解明
- b) 新規スピン分解角度分解光電子分光装置の開発
- c) 角度分解光電子分光における低温技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 銅酸化物高温超伝導体の中でも高い超伝導転移温度 (T_c) を示す物質の一つである Bi2223 の電子状態を，UVSOR BL7U において角度分解光電子分光測定を行うことで明らかにした。装置の改良により角度分解能を向上させたことで、これまで報告されていなかった新しいエネルギーバンドが存在することを世界に先駆けて観測した。理論計算との比較，さらにはモデル計算によるフィッティングを行うことで単位胞中に3つある CuO_2 面のうち外側の2枚中の電子が相関することによって引き起こされていることを明らかにした。今後このエネルギーバンドの詳細な温度変化を観測することで，高温超伝導との関連を調べる予定である。
- b) 固体の光電子分光ビームラインであった BL5U では，高性能化を目指してビームラインとエンドステーションの全面的な更新を行っている。ビームラインは2016年度より高分解能角ビームラインとしてユーザー利用を開始した。従来は検出できなかったスリットに垂直方向の電子を，電子レンズにより取り込むことで，広い運動量空間の電子状態を簡単に測定できる。現在はこれまでにない高効率イメージスピン検出器を開発中であり，スピン分解検出をする酸化鉄ターゲットまで電子を導くことに成功している。これらの機能をあわせることで3次元のスピン分解角度分解光電子分光測定が可能となると考えられる。
- c) 角度分解光電子分光実験の高エネルギー分解能測定には，試料をどれだけ冷却できるかが重要となる。BL5U 用に開発した冷却可能な5軸マニピュレータは試料部において4.6 K，参照用金部で4 K という低温を達成し，放射光施設の光電子分光装置としては世界でもトップクラスである。現在 UVSOR で最も高分解能な測定が可能である BL7U では，試料を12 K までしか冷却することができないため，その性能を十分生かすことができていない。そこで試料部において5 K を目指して新たに6軸マニピュレータの開発を進めている。現在試料位置で約7 K を達成したがさらなる低温化を目指して開発を進めている。2016年度中にビームラインへ導入する予定である。

B-1) 学術論文

J. OKABAYAH, S. MIYASAKA, K. HEMMI, K. TANAKA, S. TAJIMA, H. WADATI, A. TANAKA, Y. TAKAGI and T. YOKOYAMA, “Investigating Orbital Magnetic Moments in Spinel-Type MnV_2O_4 Using X-Ray Magnetic Circular Dichroism,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 104703 (5 pages) (2015).

M. NAKAYAMA, T. KONDO, Z. TIAN, J. J. ISHIKAWA, M. HALIM, C. BAREILLE, W. MALAEB, K. KURODA, T. TOMITA, S. IDETA, K. TANAKA, M. MATSUNAMI, S. KIMURA, N. INAMI, K. ONO, H. KUMIGASHIRA, L. BALENTS, S. NAKATSUJI and S. SHIN, “Slater to Mott Crossover in the Metal to Insulator Transition of $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$,” *Phys. Rev. Lett.* **117**, 056403 (6 pages) (2016).

K. HAGIWARA, Y. OHTSUBO, M. MATSUNAMI, S. IDETA, K. TANAKA, H. MIYAZAKI, J. E. RAULT, P. LE FEVRE, F. BERTRAN, A. TALEB-IBRAHIMI, R. YUKAWA, M. KOBAYASHI, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, K. SUMIDA, T. OKUDA, F. IGA and S. KIMURA, “Surface Kondo Effect and Non-Trivial Metallic State of the Kondo Insulator YbB_{12} ,” *Nat. Commun.* **7**, 12690 (2016).

T. YOSHIDA, W. MALAEB, S. IDETA, D. H. LU, R. G. MOOR, Z.-X. SHEN, M. OKAWA, T. KISS, K. ISHIZAKA, S. SHIN, S. KOMIYA, Y. ANDO, H. EISAKI, S. UCHIDA and A. FUJIMORI, “Coexistence of a Pseudogap and a Superconducting Gap for the High- T_c Superconductor $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ Studied by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy,” *Phys. Rev. B* **93**, 014513 (5 pages) (2016).

B-4) 招待講演

田中清尚, 「UVSOR におけるスピン分解角度分解光電子分光」, 界面スピン軌道結合の微視的解明と巨大垂直磁気異方性デバイスの創製第2回研究会, 京都工芸繊維大学, 京都, 2016年11月.

B-7) 学会および社会的活動

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2014–2016).

日本放射光学会誌編集委員 (2016–). (出田真一郎)

B-10) 競争的資金

科研費若手研究 (スタートアップ), 「高温超伝導体の反射型テラヘルツ時間領域分光」, 田中清尚 (2008年–2009年).

科研費若手研究 (B), 「電荷・スピンストライプ秩序相を有する高温超伝導体の電子構造」, 田中清尚 (2012年–2014年).

グローバル COE プログラム「物質の量子機能解明と未来型機能材料創出」萌芽的研究, 「鉄系超伝導体における低エネルギー電荷応答」, 田中清尚 (2012年).

自然科学研究機構新分野創成センターイメージングサイエンス研究分野プロジェクト, 「ディフレクターを用いた新しい高分解能運動量空間電子状態イメージング」, 田中清尚 (2015年).

科研費若手研究 (B), 「角度分解光電子分光及びフェムト秒時間分解電子線回折による高温超伝導起源の解明」, 出田真一郎 (2015年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

これまで整備・立ち上げを進めてきた UVSOR の BL5U の高分解能角度分解光電子分光ビームラインは2016年度より運用を開始した。今後は高分解能を利用した実験を行いつつ、スピン分解測定の開発を進めていきたい。

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

繁 政 英 治（准教授）（1999 年 5 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：原子分子分光，光化学反応動力学

A-2) 研究課題：

- a) 角度分解高分解能電子分光法による内殻励起原子分子の電子緩和過程
- b) 極紫外光渦による原子分子の光イオン化ダイナミクス
- c) 短波長強レーザー場中の原子分子過程
- d) 内殻励起分子に特有な光解離ダイナミクス

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) BL6U は、40 ～ 400 eV の光エネルギー範囲において、分解能 10000 以上かつ光強度 10^{10} 光子数／秒以上の性能を有しており、低エネルギー領域における世界最先端ビームラインの一つである。2009 年初秋以降、気体の高分解能電子分光を行うための実験装置の整備を進め、アンジュレータとビームライン分光器、及び電子エネルギー分析器を同時に制御できるようにした。これにより、電子スペクトルを光のエネルギーの関数として計測する、高分解能二次元電子分光実験が定常的に行えるようになった。アンジュレータの偏光方向に対して電子エネルギー分析器を回転させることにより、電子放出の偏光依存性に関する情報も取得可能である。原子や分子の内殻電子励起状態や多電子励起状態の電子構造とその崩壊過程を詳細に調べる実験研究を協力研究や国際共同研究として継続して行っている。
- b) 円偏光アンジュレータ放射の高次光は、光渦の性質を持ち合わせていることが知られている。螺旋波面の構造に応じて、光に軌道角運動量が付与されるので、原子分子との相互作用において、通常の電子遷移とは異なる選択則に従うものと考えられる。2014 年度から、光渦光子によるイオン化に関する実験研究を開始した。極紫外域の光渦が利用可能な BL1U に電子画像観測装置を設置し、ヘリウム原子からの光電子角度分布測定を行った。複数回のビームタイムにより、実験方法を確立すると共に、問題点の洗い出しにより、電子画像観測装置の性能安定性を向上させる改良を施し、信頼性の高いデータを取得することに成功した。現状の実験条件では、光イオン化における光渦の効果は極めて小さく、検出限界を下回っていることが明らかになった。
- c) 日本の X 線自由電子レーザー（XFEL）、SACLA 及びその試験加速器である SCSS において、X 線や極端紫外領域の強レーザー光に曝された原子分子及びクラスターの挙動について、発光分光法に基づく実験研究を進めている。特に、FEL 光により励起された原子が集団として振る舞う量子光学効果、超蛍光に関しては、計算機シミュレーションを援用することにより、競合する超蛍光が発展、抑制されるメカニズムを明らかにした。今年度から運用を開始した SACLA の BL1 に、我々が開発した極紫外発光観測装置を持ち込みビームライン下流に放射される極紫外領域の発光の観測を試みた。その結果、パルス状の時間構造を有する極紫外発光の観測に成功した。現在、データ解析を進めている。
- d) 内殻励起分子の光解離ダイナミクスについて、我々が開発した電子・イオン同時計測装置を利用した実験を独自の研究及び協力研究として進めている。小さな分子に関しては、内殻イオン化後に高効率で生成されるオージェ終状態としての二価分子イオンについて、準安定種の電子状態の同定や解離極限と電子状態との相関を決定することに

成功している。昨年度から、観測対象を混合分子クラスターに広げるべく装置の開発研究を行っている。数百分子サイズの分子クラスターに標的分子をピックアップさせることにより、液相・固相と同様の周辺環境下における標的分子の内殻励起光解離過程の観測を行っている。予備的な実験として、 N_2 分子クラスター中に O_2 分子を混合し、 $O1s$ 電子を光イオン化したところ、 O_2^+ のみならず、 N_2^+ や N^+ 、更には NO^+ などが観測された。このことは、光吸収した O_2 から周辺の N_2 への電荷移行やエネルギー移行が起きていることを示唆している。更なるクラスター生成の高効率化を目指した装置開発を継続中である。

B-1) 学術論文

C. OHAE, J. R. HARRIES, H. IWAYAMA, K. KAWAGUCHI, S. KUMA, Y. MIYAMOTO, M. NAGASONO, K. NAKAJIMA, I. NAKANO, E. SHIGEMASA, N. SASAO, S. UETAKE, T. WAKABAYASHI, A. YOSHIMI, K. YOSHIMURA and M. YOSHIMURA, “Simultaneous Measurements of Superradiance at Multiple Wavelength from Helium Excited States: II. Analysis,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 034301 (10 pages) (2016).

O. TRAVNIKOVA, T. MARCHENKO, G. GOLDSZTEJN, K. JÄNKÄLÄ, N. SISOURAT, S. CARNIATO, R. GUILLEMIN, L. JOURNAL, D. CÉOLIN, R. PÜTTNER, H. IWAYAMA, E. SHIGEMASA, M. N. PIANCASTELLI and M. SIMON, “Hard-X-Ray-Induced Multistep Ultrafast Dissociation,” *Phys. Rev. Lett.* **116**, 213001 (5 pages) (2016).

H. IWAYAMA, T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA and E. SHIGEMASA, “Stability and Dissociation Dynamics of N_2^{++} Ions Following Core Ionization Studied by an Auger-Electron-Photoion Coincidence Method,” *J. Chem. Phys.* **145**, 034305 (8 pages) (2016).

Y. HIKOSAKA, R. MASHIKO, Y. KONOSU, K. SOEJIMA and E. SHIGEMASA, “Electron Emission Relevant to Inner-Shell Photoionization of Condensed Water Studied by Multi-Electron Coincidence Spectroscopy,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **213**, 17–21 (2016).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会渉外委員 (2005–2006).

日本放射光学会評議員 (2006–2008, 2010–2011, 2012–2014, 2015–).

日本放射光学会渉外幹事 (2007–2009).

学会の組織委員等

日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウム組織委員 (1999–2001, 2009, 2012).

第13回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウム実行副委員長 (1999).

第13回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (1999).

第19回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウム実行委員 (2005).

SRI06 (シンクロトロン放射装置技術国際会議) プログラム委員 (2005).

第22回化学反応討論会実行委員 (2006).

第20回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2006).

第21回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2007).

第2回AOFRR (放射光研究アジア-オセアニアフォーラム) プログラム委員 (2007).

第23回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2009).
第24回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2010).
第25回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2011).
第30回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウムプログラム委員 (2016).
第33回化学反応討論会実行委員 (2016).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2014–2015).

東京大学物性研究所共同利用施設専門委員 (2005–2006).

(財) 高輝度光科学研究センター利用研究課題選定委員会選定委員 (2007–2009, 2013–2015).

(財) 高輝度光科学研究センター利用研究課題選定委員会分科会委員 (2011–2012).

学会誌編集委員

Proceedings of 11th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure, Special Issue of Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Elsevier, Guest Editor (2010).

Synchrotron Radiation News, Correspondent (2001–).

日本放射光学会学会誌編集委員 (2005–2006).

日本放射光学会学会誌編集委員 (2010–2012). (岩山洋士)

その他

公益財団法人高輝度光科学研究センター・SACLA 利用研究課題審査委員 (2016–2017).

B-8) 大学での講義, 客員

新潟大学大学院自然環境科学科, 自然環境科学集中講義「原子分子物理学II」, 2016年9月5日–7日, 11月28日–30日.

名古屋大学小型シンクロトン光研究センター, 客員准教授, 2007年9月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「多重同時計測法で探る内殻励起分子の超高速緩和ダイナミクス」, 繁政英治 (2007年–2008年).

科研費基盤研究(B), 「短波長自由電子レーザーによる軟X線超蛍光の観測」, 繁政英治 (2014年–2016年).

松尾学術研究助成, 「極端紫外レーザー光によるクラスター発光分光分析」, 岩山洋士 (2010年).

科研費若手研究(B), 「自由電子レーザー励起によるレーザープラズマ光源の研究開発」, 岩山洋士 (2012年–2013年).

科研費若手研究(B), 「高温ガスセルを用いた振動励起した分子の光電子分光法の開発」, 岩山洋士 (2016年–2018年).

C) 研究活動の課題と展望

我々の専用ビームライン, BL6U での研究については, 二次元電子分光を含む高分解能電子分光法及び電子・イオン同時計測分光法を駆使した研究を推進して行く。観測対象としては, 従来通り, 周期律表の第2周期元素及び第3周期元素を含む分子の 1s 及び 2p 内殻励起領域を中心とするが, 混合分子クラスターに関する研究を新たに展開するためのクラスター装置の開発研究も継続する。内殻正孔状態の脱励起過程に特徴的な高励起一価分子イオンや二価分子イオンの解離過程や安定性について詳細に調べる。これらにより, 電子緩和過程と解離の競合や, 解離過程における結合組み換え反応など, 内殻励起分子に特有な光解離ダイナミクスや二価分子イオンの安定性に対する電子状態の果たす役割について理解を深め

たい。一方、BL1Uにおける極紫外域の光渦を利用した電子分光実験については、今年度整備された分光ビームラインにおいて、分光された光渦光子による実験を行う。また、短波長FELの出現によって可能となった、EUVからX線領域における強レーザー場中の原子分子、及びクラスターの挙動に関する研究については、発光分光法による実験研究を継続する。特に、最近のSACLAでの実験で観測された、超蛍光である可能性が高いEUV領域における発光現象について、蛍光強度の試料濃度依存性を高分解能で時分割測定することにより、世界初となるEUV領域での超蛍光観測の確証を得たい。

先端レーザー開発研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

平等拓範（准教授）（1998年2月1日着任）

A-1) 専門領域：量子エレクトロニクス，光エレクトロニクス，レーザー物理，非線形光学

A-2) 研究課題：

- a) マイクロドメイン構造制御に関する研究
- b) マイクロドメイン光制御に関する研究
- c) マイクロ固体フォトンニクスの展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

分子科学に関連して重要な波長域にレーザーの高輝度光を展開する為の固体レーザー，非線形波長変換法につき包括的な研究を進めている。特には近年のマイクロ固体フォトンニクス [マイクロチップ Nd:YVO₄ レーザー（1990年），Yb:YAG レーザー（1993年），セラミックレーザー（1997年），バルク擬位相整合（QPM）素子：大口径周期分極反転 MgO:LiNbO₃（PPMgLN）（3mm 厚 2003年，5mm 厚 2005年，10mm 厚 2012年）] を先導すると共に，共同研究を通し赤外域分子分光などにその展開を図っている。国際誌の雑誌編集，特集号企画から国際シンポジウム・会議の企画提案，開催に積極的に参加する事でその成果を内外に発信している。

- a) マイクロドメイン構造，界面（粒界面，結晶界面，さらには自発分極界面）を微細に制御する固相反応制御法の研究として，レーザーセラミックス，レーザー素子，分極反転素子の作製プロセスの高度化を図っている。特に，固体レーザーの発光中心である希土類イオンの軌道角運動量を利用したマイクロドメインの配向制御は，これまで不可能だった異方性セラミックスによるレーザー発振を成功させただけでなく原理的にはイオンレベルでの複合構造を可能とする。さらに最近，表面活性接合による異種材料接合に成功し，Distributed Face Cooling（DFC）構造による Tiny Integrated Laser（TILA）なる次世代の高性能な高集積小型レーザーに関するコンセプトが検証された。これより，新たなフォトンニクスを創出できるものと期待している。
- b) 光の発生，増幅，変換の高度制御を可能とする為の研究として，希土類イオンの発光・緩和機構の解明，固体中の光，エネルギー伝搬，さらにはマイクロドメイン構造と光子及び音子の相互作用機構解明，非線形光学過程の解明，モデル化を進めている。Yb レーザーの機構解明，Nd レーザーの直接励起可能性，希土類レーザーの励起光飽和特性，YVO₄ の高熱伝導率特性の発見，実証に繋がったばかりでなく，マイクロ共振器の高輝度効果，レーザー利得と非線形光学過程の量子相関などの興味深い展開も見せている。特にレーザー科学発展の中で生じたパルスギャップ領域であるサブナノ秒からピコ秒の便利な光源開拓に関する貢献，パルスギャップレーザーによる新現象の解明などが期待できる。
- c) 開発した光素子を用いた新規レーザー，波長変換システムの開発と展開を図っている。これまでもエッジ励起セラミック Yb:YAG マイクロチップレーザーによる高平均出力動作，手のひらサイズジャイアントパルスマイクロチップレーザーからの高輝度温度光発生，マイクロチップレーザーからの UV 光（波長：266 nm）からテラヘルツ波（波長：100 ~ 300 μm），さらには高効率・高出力のナノ秒光パラメトリック発生（出力エネルギー約 1 J，効率約 80%），波長 5~12 mm に至る広帯域波長可変中赤外光発生，1.5 サイクル中赤外光からのコヒーレント軟 X 線（波長：~5 nm）・アト秒（200 ~ 300 as）発生などをマイクロ固体フォトンニクスで実証した。特にマイクロチップレーザーでは，パルス

ギャップであるサブナノ秒での高輝度光発生が望め、光イオン化過程に有利なため極めて低いエネルギーで効率的なエンジン点火が可能となる。すでに世界ではじめての自動車エンジン搭載、走行実験にも成功している。また、この高輝度光は光パラメトリック過程によるテラヘルツ波発生にも有利で、自由電子レーザーを凌駕する尖頭値で 50 kW に至る高出力化を実証できた。今後、分子の振動状態についてのより詳細な分光学的情報を得ることが出来ると期待される。

B-1) 学術論文

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “High-Gain Mid-Infrared Optical-Parametric Generation Pumped by Microchip Laser,” *Opt. Express* **24**, 1046–1052 (2016).

A. KAUSAS and T. TAIRA, “Giant-Pulse Nd:YVO₄ Microchip Laser with MW-Level Peak Power by Emission Cross-Sectional Control,” *Opt. Express* **24**, 3137–3149 (2016).

常包正樹, 平等拓範, 「自動車エンジン点火用の超小型固体レーザー」, *光学* **45**, 111–113 (2016).

M. TSUNEKANE and T. TAIRA, “Direct Measurement of Temporal Transmission Distribution of a Saturable Absorber in a Passively Q-Switched Laser,” *IEEE J. Quantum Electron.* **52**, 5200107 (7 pages) (2016).

T. GOTO, R. MORIMOTO, J. W. PRITCHARD, M. MINA, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, T. TAIRA and M. INOUE, “Magneto–Optical Q-Switching Using Magnetic Garnet Film with Micromagnetic Domains,” *Opt. Express* **24**, 17635–17643 (2016).

R. MORIMOTO, T. GOTO, J. PRITCHARD, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, H. UCHIDA, M. MINA, T. TAIRA and M. INOUE, “Magnetic Domains Driving a Q-Switched Laser,” *Sci. Rep.* **6**, 38679 (7 pages) (2016).

L. ZHENG, A. KAUSAS and T. TAIRA, “>MW Peak Power at 266 nm, Low Jitter kHz Repetition Rate from Intense Pumped Microlaser,” *Opt. Express* **24**, 28748–28760 (2016).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

L. ZHENG and T. TAIRA, “Sub-Nanosecond Passively Q-Switched Monolithic Green Laser,” *LASE 2016, SPIE Photonics West*, 9730-46 (2016).

V. YAHIA and T. TAIRA, “Toward GW-Class High-Brightness Microchip Laser System,” *10th International Conference on Optics-photonics Design & Fabrication (ODF’16)*, 1PDb-07 (2016).

K. NAWATA, S. HAYASHI, H. ISHIZUKI, K. MURATE, K. IMAYAMA, K. KAWASE, T. TAIRA and H. MINAMIDE, “Study of Effective Terahertz-Wave Parametric Generation Depending on Pump Duration,” *7th International Workshop on Terahertz Technology and Applications* (2016).

Y. SATO and T. TAIRA, “Numerical Model for Thermal Parameters in Optical Materials,” *Laser Sources and Applications (Conference 9893), SPIE Photonics Europe 2016*, 9893-15 (2016).

H. H. LIM and T. TAIRA, “>0.5 MW Peak Power, Widely Pulse-Width Tunable Nd:YAG Ceramic Microchip Laser by Cavity Length Control,” *The 10th Asia-Pacific Laser Symposium (APLS 2016)*, Thu-P-95 (2016).

K. HAGITA, T. IKEO, Y. ISHIKAWA, Y. HIGASHI, N. JIKUTANI, T. TAIRA and T. SUZUDO, “Multi-Pulse Oscillation of Passively Q-Switched Micro-Laser Pumped by VCSEL Module,” *The 4th Laser Ignition Conference (LIC’16), OPIC’16, LIC3-2* (2016).

- V. YAHIA and T. TAIRA**, “Development of a 0.3 GW Microchip-Seeded Amplifier,” *The 4th Laser Ignition Conference (LIC’16), OPIC’16*, LIC3-3 (2016).
- L. ZHENG and T. TAIRA**, “1 kHz Repetition Rate, Giant-UV-Pulse Generation in [100] Nd:YAG/[110] Cr:YAG Micro-Laser Under Intensive Pulse Pumping,” *The 4th Laser Ignition Conference (LIC’16), OPIC’16*, LICp-5 (2016).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Polarization Dependence of Saturable Absorption in Cr:YAG,” *The 4th Laser Ignition Conference (LIC’16), OPIC’16*, LICp-6 (2016).
- A. KAUSAS, P. LOISEAU, G. AKA, Y. ZHENG and T. TAIRA**, “Temperature Stable Giant-Pulse Green Micro-Laser,” *The 4th Laser Ignition Conference (LIC’16), OPIC’16*, LIC7-3 (2016).
- H. H. LIM and T. TAIRA**, “Minimum Air-Breakdown Energy Using Giant-Pulse Width Tunable System Based on Microchip Laser,” *The 4th Laser Ignition Conference (LIC’16), OPIC’16*, LIC9-3 (2016).
- S. HAYASHI, K. NAWATA, H. ISHIZUKI, K. MURATE, K. IMAYAMA, Y. TAKIDA, Y. TOKIZANE, T. TAIRA, K. KAWASE and H. MINAMIDE**, “Study on Parametric Gain of Nonlinear Wavelength Conversion in a LiNbO₃,” *The 5th Advanced Lasers and Photon Sources Conference (ALPS’16), OPIC’16*, ALPSp14-34 (2016).
- M. BAUDISCH, H. PIRES, U. ELU, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and J. BIEGERT**, “44 μ J, 160 kHz, few-cycle mid-IR OPCPA with chirp reversal,” *CLEO 2016*, STu3I.5 (2016).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Initial Behavior of the Relaxation Oscillation at Zero-Phonon Line of Yb Gain Media,” *CLEO 2016*, JTu5A.33 (2016).
- T. GOTO, R. MORIMOTO, J. PRITCHARD, T. YOSHIMOTO, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, L. P. BOEY, M. MINA, T. TAIRA and M. INOUE**, “Diode Laser Pumped Solid State Laser Using Magneto-Optical Q Switch,” *CLEO 2016*, JTu5A.34 (2016).
- C. K. D. SUDDAPALLI, J. WEI, A. J. DEBRAY, V. KEMLIN, B. BOULANGER, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and M. EBRAHIM-ZADEH**, “Picosecond Mid-Infrared Optical Parametric Oscillator Based on Cylindrical MgO:PPLN,” *CLEO 2016*, STh1P.2 (2016).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Periodic Laminar Structured Quartz for Intense-Laser Pumped Wavelength Conversion,” *7th EPS-QEOD Europhoton Conference*, PO-1.13 (2016).
- R. MORIMOTO, T. GOTO, J. PRITCHARD, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, M. MINA, T. TAIRA and M. INOUE**, “Downsizing of Magneto-Optical Q-Switch Using Magnetic Garnet Films,” *The 40th Annual Conference on MAGNETICS in Japan*, 6pB-1 (2016).
- H. LIM and T. TAIRA**, “Continuously Pulse Width Tunable Nd:YAG Ceramic Micro Giant-Pulse Laser for Laser Induced Breakdown,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JTu2A.35 (2016).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Polarization Dependence of Saturable Absorption Characteristics in Cr⁴⁺:YAG,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATu3A.3 (2016).
- A. KAUSAS, P. LOISEAU, G. AKA, Y. ZHENG and T. TAIRA**, “Temperature Stable Operation of YCOB Crystal for Giant-Pulse Green Micro-Laser,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATu5A.7 (2016).
- T. GOTO, R. MORIMOTO, J. PRITCHARD, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, H. UCHIDA, M. MINA, T. TAIRA and M. INOUE**, “Actively Controlled Q-Witched Laser Using Domains in Magneto-optical Garnet Film,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATh4A.7 (2016).

J. YUE, T. TAMADA, M. KAMATA, L. ZHENG, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “>2 MW Peak Power at 1560 nm from Micro Giant-Pulse Laser/Amplifier with PPMgLN OPG,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, ATh4A.8 (2016).

B-3) 総説, 著書

D. J. HAGAN, J. DADAP, Y. LU, N. C. PANOIU, M. SHEIK-BAHAE and T. TAIRA, “Introduction: Nonlinear Optics (NLO) 2015 Feature Issue,” *Opt. Mater. Express* **6**, 466–468 (2016). (Opening Article)

K. GALLO, Y. JEONG, T. TAIRA, S. JIANG and F. ILDAY, “Focus Issue Introduction: Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2015,” *Opt. Express* **24**, 5674–5682 (2016). (Opening Article)

平等拓範, 「レーザ点火技術の最新動向～自動車エンジンからコージェネレーションガスエンジンまで」, *電気学会誌* **136**, 296–300 (2016).

平等拓範, 「マイクロドメイン制御によるハイパワーレーザー材料」, *応用物理* **85**, 863–869 (2016).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

平等拓範, 「ジャイアントマイクロフォトニクスのエネルギ展開——ユビキタス・ハイパワーレーザー——」, 日本学術振興会 Science Café, 日本学術振興会ワシントン研究連携センター, ワシントンDC (米国), 2016年2月.

T. TAIRA, “Laser ignitions for energy solution,” 7th International Symposium on Optical Materials (IS-OM7), Lyon (France), February 2016.

平等拓範, 「パネルディスカッション ニッポンの向かう先はいずこか? 導入トーク: 光・レーザー先端研究における世界の潮流・国際戦略分析——Photonic West を中心として——」, 光産業技術振興協会第4回光材料・応用技術研究会, 東京, 2016年3月.

平等拓範, “Giant Micro-Photonics for Energy—Micro-Domain Controlled Lasers Using Magnetic Field and Spin–Orbit Interaction—,” 第100回磁性研ゼミナール, 豊橋技術科学大学, 豊橋, 2016年3月.

T. TAIRA, “Opening remarks for LIC,” LIC plenary session, The 4th Laser Ignition Conference (LIC’16), OPIC’16, Yokohama (Japan), May 2016.* (*Plenary Talk*)

T. SUZUDO, K. HAGITA, T. IKEO, K. IZUMIYA, N. JIKUTANI, Y. HIGASHI and T. TAIRA, “Total Design of High Power VCSEL Pumped Passively Q-Switched Micro-Lasers for Laser Ignition,” The 4th Laser Ignition Conference (LIC’16), OPIC’16, Yokohama (Japan), May 2016.

R. BHANDARI, K. TOJO and T. TAIRA, “Development of UV Microchip Lasers for Compact MALDI Spectroscopy Systems,” The 4th Laser Ignition Conference (LIC’16), OPIC’16, Yokohama (Japan), May 2016.

T. SAKAMOTO, K. OHISHI, Y. FURUKAWA, L. ZHENG and T. TAIRA, “A Flange-Mounted UV Microchip Laser for Imaging Mass Spectrometry,” The 4th Laser Ignition Conference (LIC’16), OPIC’16, Yokohama (Japan), May 2016.

T. GOTO, R. MORIMOTO, J. W. PRITCHARD, T. YOSHIMOTO, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, M. MINA, T. TAIRA and M. INOUE, “Magneto–Optical Q-Switching with Magnetic Garnet Film,” The 4th Laser Ignition Conference (LIC’16), OPIC’16, Yokohama (Japan), May 2016.

平等拓範, 「レーザー点火技術と波及効果」, レーザー特別セミナー「自動車の安全を支える光技術」, OPTICS & PHOTONICS International Exhibition 2016 (OPIC’16), パシフィコ横浜, 横浜, 2016年5月.

平等拓範,「テラヘルツ波発生用のマイクロチップレーザー」,日本学術振興会第303回光エレクトロニクス第130委員会,静岡大学工学部S-Port,静岡,2016年7月.

平等拓範,「マイクロ固体フォトンクスによる小型ジャイアントパルスレーザー」,レーザー学会東京支部セミナー第27回「若手技術者のためのレーザー応用セミナー」,慶應義塾大学,横浜,2016年7月.

平等拓範,「マイクロレーザーの新展開と生体光イメージングへの可能性」,日本学術振興会第1回光エレクトロニクス第185委員会,アクティシティ浜松,浜松,2016年7月.

平等拓範,「自動車へのレーザー応用加速の理由(ガイダンス)」,光産業技術振興協会第2回光材料・応用技術研究会,東京,2016年8月.

T. TAIRA, “Micro-Domain Control Toward New Lasers,” The 40th Annual Conference on MAGNETICS in Japan, Kanazawa (Japan), September 2016.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Engine Ignition and Sensing,” International Conference “Global/Local Innovations for Next Generation Automobiles,” Sendai (Japan), October 2016.

T. TAIRA, “GW-Class Giant-Pulse Micro-Lasers by Using Domain Control,” CerSJ-GOMD Joint Symposium on Glass Science and Technologies, Kyoto (Japan), November 2016.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Engine Ignition,” The Third Symposium on Combustion Diagnostics, Xi'an (China), November 2016.

T. TAIRA, “Giant Micro-photonics for Ubiquitous Power Laser,” Xi'an Institute of Optics and Precision Mechanics (XIOPM), Xi'an (China), November 2016.

T. TAIRA, “Giant Micro-photonics for Ubiquitous Power Laser,” University of Beijing, Beijing (China), November 2016.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Energy,” Laboratory for Nanoscale Optics, John A. Paulson School of Engineering and Applied Sciences, Harvard University, Cambridge (U.S.A.), November 2016.

平等拓範,「マイクロ固体フォトンクスによる高輝度テラヘルツ波生成」,名古屋市工業研究所,公益財団法人名古屋産業振興公社,テラヘルツ応用技術講演会〜テラヘルツ波の応用可能性と展望〜,名古屋市工業研究所,名古屋,2016年11月.

T. TAIRA, “Domain Control Toward MW to Sub-GW Giant-Pulse Micro-Lasers,” 12th Laser Ceramics Symposium (LCS2016), Saint-Louis (France), November 2016.

平等拓範,「接合・界面制御と固体レーザーの高性能化」,日本学術振興会第7回接合界面創成技術第191委員会,東京大学工学部,東京,2016年12月.

B-5) 特許出願

特願 2016-002667,「受動Qスイッチレーザ装置」,平等拓範,カウシャス アルヴィダス,鄭麗和(自然科学研究機構),2016年.

特願 2016-116603,「レーザ装置とその製造方法」,平等拓範,カウシャス アルヴィダス,鄭麗和,ヤヒア ヴァンサン,安原亮(自然科学研究機構),2016年.

特願 2016-161228,「パルス光発生装置」,石月秀貴,平等拓範(自然科学研究機構),2016年.

特願 2016-174793,「選択増幅装置」,平等拓範,ヤヒア ヴァンサン(自然科学研究機構),2016年.

特願 2016-211991,「レーザー部品」,平等拓範,カウシャス アルヴィダス,鄭麗和(自然科学研究機構),2016年.

特願 2016-242700,「皮膚レーザ治療器」,高橋勉,高橋一哲,平等拓範(ユニタック,自然科学研究機構),2016年.

B-6) 受賞, 表彰

斎川次郎, 応用物理学会北陸支部発表奨励賞 (1998).

平等拓範, 第23回(社)レーザー学会業績賞(論文賞)(1999).

平等拓範, 第1回(財)みやぎ科学技術振興基金研究奨励賞 (1999).

平等拓範, 他, 第51回(社)日本金属学会金属組織写真奨励賞 (2001).

庄司一郎, 第11回(2001年秋季)応用物理学会講演奨励賞 (2001).

平等拓範, 他, (社)日本ファインセラミックス協会技術振興賞 (2002).

平等拓範, 文部科学省文部科学大臣賞(第30回研究功績者) (2004).

N. PAVEL, The ROMANIAN ACADEMY Awards, The “Constantin Miculescu” Prize (2004).

斎川次郎, 佐藤庸一, 池末明生, 平等拓範, 第29回(社)レーザー学会業績賞(進歩賞)(2005).

秋山 順, 愛知県若手研究者奨励事業第2回「わかしゃち奨励賞(優秀賞)」(2008).

平等拓範, 第24回光産業技術振興協会櫻井健二郎氏記念賞 (2008).

秋山 順, 第26回(2009年春季)応用物理学会講演奨励賞 (2009).

栗村 直, 平等拓範, 谷口浩一, 三菱電線工業(株)平成21年度発明考案表彰(アメリカ特許 7106496号「波長変換用, 光演算用素子」他) (2010).

平等拓範, 米国光学会(OSA)フェロー (2010).

常包正樹, 猪原孝之, 安藤彰浩, 木戸直樹, 金原賢治, 平等拓範, 第34回(社)レーザー学会業績賞(論文賞)オリジナル部門 (2010).

平等拓範, 米国電気電子学会(IEEE)シニア・メンバー (2011).

平等拓範, 国際光工学会(SPIE)フェロー (2012).

石月秀貴, 平等拓範, 第37回(社)レーザー学会業績賞(進歩賞) (2013).

平等拓範, 米国電気電子学会(IEEE)フェロー (2014).

T. GOTO, R. MORIMOTO, J. PRITCHARD, N. PAVEL, T. YOSHIMOTO, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, M. MINA, T. TAIRA and M. INOUE, MORIS2015 Best Poster Award, 147th Committee on Amorphous and Nano-Crystalline Materials, Japan Society for the Promotion of Science (2015).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

レーザー学会レーザー素子機能性向上に関する専門委員会幹事 (1997–1999).

レーザー学会研究会委員 (1999–).

電気学会高機能全固体レーザと産業応用調査専門委員会幹事 (1998–2002).

レーザー学会レーザー用先端光学材料に関する専門委員会委員 (2000–2002).

光産業技術振興協会光材料・応用技術研究会幹事 (2004–).

(独)新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)評価委員 (2005–2006), 技術委員 (2011–2013), 事前書面審査 (2013–2018).

レーザー学会評議員 (2005–).

レーザー学会「マイクロ固体フォトニクス」専門委員会主査 (2006–2009).

米国光学会 Optical Society of America (OSA) 非線形光学テクニカル・グループ議長 (2008–2012).
 応用物理学会日本光学会レーザーディスプレイ技術研究グループ顧問 (2008–2012), 実行委員 (2012–).
 財団法人光産業技術振興協会多元技術融合光プロセス研究会幹事 (2009–2017).
 科学技術交流財団「ジャイアントマイクロフォトニクス」研究会座長 (2009–2011).
 レーザー学会「マイクロ固体フォトニクスの新展開」専門委員会主査 (2009–2012).
 米国光学会 The Optical Society (OSA) フェロー (2010–).
 科学技術交流財団「ジャイアントマイクロフォトニクス II」研究会座長 (2011–2013).
 レーザー学会「マイクロ固体フォトニクス」技術専門委員会主査 (2012–2018).
 国際光工学会 The International Society for Optical Engineering (SPIE) (米国) フェロー (2012–).
 科学技術交流財団「ジャイアントマイクロフォトニクス III」研究会座長 (2013–2015).
 米国光学会 The Optical Society (OSA) 評議員 (Council, Board of Meeting) (2014–).
 米国電気電子学会 The Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE) フェロー (2014–).
 科学技術交流財団「ジャイアントマイクロフォトニクス IV」研究会座長 (2015–2017).
 米国光学会 The Optical Society (OSA), Charles Hard Townes Award 表彰委員会委員 (Award Committee) (2015–2016).
 4th Laser Ignition Conference (LIC'16) 国際会議統括議長 (2015–2016).
 SPIE Photonics Europe 2016—Laser Sources and Applications (EPE111) 国際会議委員会共同議長 (2015–2016).
 日本燃焼学会「レーザー点火研究分科会」研究委員会研究分科会主査 (2016).
 7th EPS (欧州物理学会) —QEOD Europhoton Conference, Research in Laser Science and Applications Prize 2016 国際会議審査員 (2016).
 第24回国際光学委員会総会 (ICO-24), Nonlinear Optics カテゴリチェア (2016–2017).
 5th Laser Ignition Conference (LIC'17) 国際会議プログラム委員会議長 (2016–2017).
 米国光学会 (OSA) Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2017 国際会議統括議長 (2016–2017).
 学会の組織委員等
 OSA, Advanced Solid-State Photonics (ASSP 2008) 国際会議プログラム委員会共同議長 (2007–2008).
 OSA, Nonlinear Optics (NLO 2009) 国際会議プログラム委員会共同議長 (2008–2009).
 CLEO/PacificRim 2009 国際会議分科委員会共同議長 (2008–2009).
 OSA, Advanced Solid-State Photonics (ASSP 2009) 国際会議プログラム委員会共同統括議長 (2008–2009).
 OSA, Nonlinear Optics (NLO 2011) 国際会議プログラム委員会共同統括議長 (2010–2011).
 1st Laser Ignition Conference (LIC'13) 国際会議プログラム委員会共同統括議長 (2012–2015).
 LASERS 2001 国際会議プログラム委員 (2001).
 レーザー学会学術講演会プログラム委員 (2001, 2004, 2006).
 CLEO/PacificRim 2005 国際会議プログラム委員 (2004–2005).
 OSA, Advanced Solid-State Photonics 国際会議プログラム委員 (2005–2010).
 23rd International Laser Radar Conference 国際会議実行委員 (2005–2006).
 Int. Conf. “Micro- to Nano-Photonics—ROMOPT 2006” プログラム委員 (2005–2006).
 CLEO, Nonlinear Optics Application 国際会議分科委員 (2006–2009).
 OSA, Nonlinear Optics 国際会議プログラム委員 (2006–2011).

3rd Laser Ceramics Symposium: International Symposium on Transparent Ceramics for photonic applications 国際会議諮問委員 (2006–2007).

APLS 2008 国際会議プログラム委員 (2007–2008).

3rd EPS Europhoton Conference on Solid-State and Fiber Coherent Light Sources 国際会議分科委員 (2007–2008).

レーザー学会学術講演会第28回年次大会実行委員会委員 (2007).

レーザー・光波・マイクロ波国際会議2008 (ILLMC2008) 国際学会諮問委員 (2008).

International Workshop on Holographic Memories (IWHM) 2008 プログラム委員会委員 (2008).

OECC2008「CLEO Focus: Frontiers in Photonics」プログラム分科委員会委員 (2008).

4th Laser Ceramics Symposium: International Symposium on Transparent Ceramics for Laser 国際会議諮問委員 (2008).

Int. Conf. “Micro- to Nano-Photonics II —ROMOPT 2009” プログラム委員 (2008–2009).

レーザー学会学術講演会第30回年次大会実行委員会委員 (2009).

4th Europhoton Conference on “Solid-State, Fiber and Waveguide Coherent Light Sources” 国際会議分科委員 (2009–2010).

International Workshop on Holographic Memories & Display (IWHM&D2010) 国際会議プログラム委員会委員 (2010).

Lasers and Their Applications Symposium, Photonics Global Conference 2010 国際会議テクニカル・プログラム委員会委員 (2010).

EQEC 2011, Fundamentals of Nonlinear Optics 国際会議分科委員 (2010–2011).

Advances in Optical Materials (AIOM 2011) 国際会議プログラム委員会委員 (2010–2011).

CLEO 2011: Science & Innovations 2: Solid-State, Liquid and Gas Lasers 国際会議諮問委員 (2010–2011).

IQEC/CLEO Pacific Rim 2011, Ultrafast Optics and Photonics 国際会議分科委員会諮問委員 (2010–2011).

Laser Ceramics Symposium (7th LCS): International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications 国際会議国際諮問委員 (2011).

Pacific Rim Laser Damage Symposium—Optical Materials for High Power Lasers 国際委員会委員 (2011).

Advances in Optical Materials (AIOM 2012) 国際会議プログラム委員会委員 (2011–2012).

4th International Conference on “Smart Materials, Structures and Systems” (CIMTEC 2012), Symposium F “Smart & Adaptive Optics” 国際会議国際諮問委員 (2011–2012).

Optics & Photonics International Congress 2012 (OPIC2012), Advanced Laser & Photon Source (ALPS’12) 国際会議実行委員会およびプログラム委員会委員 (2011–2012).

5th EPS Europhoton Conference on “Solid-State and Fiber and Waveguide Coherent Light Sources” 国際会議分科委員 (2011–2012).

Laser Damage of SPIE プログラム委員 (2011–2012).

(社)レーザー学会学術講演会第32回年次大会プログラム委員 (2011–2012).

Int. Conf. “Micro- to Nano-Photonics III —ROMOPTO 2012” 国際会議プログラム委員 (2011–2012).

レーザー学会レーザーの農業応用専門委員会委員 (2012–2014).

APLS 2012 国際会議プログラム委員 (2012–2012).

レーザー学会諮問員 (2012–2015).

レーザー学会レーザー照明・ディスプレイ専門委員会委員 (2012–2015).

CLEO 2013: Science & Innovations 02: Solid-State, Liquid, Gas, and High-Intensity Lasers 国際会議諮問委員 (2012–2013).

レーザー学会レーザー衝撃科学の基礎と応用専門委員会委員 (2012–2015).

Optics & Photonics International Congress 2013 (OPIC2013) 国際会議組織委員会委員 (2012–2013).

International Workshop on Holography and related technologies 2012 (IWH 2012) 国際会議プログラム委員会委員 (2012).

8th Laser Ceramics Symposium (LCS): International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications 国際会議プログラム委員会委員 (2012).

SPIE/SIOM Pacific Rim Laser Damage 2013 国際会議国際委員会委員 (2012–2013).

CLEO-PR 2013 国際会議プログラム委員会委員 (2012–2013).

Materials Committee, Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2013 国際会議プログラム委員会委員 (2012–2013).

International Workshop on Holography and Related Technologies 2013 (IWH 2013) 国際会議プログラム委員会委員 (2013).

Optics & Photonics International Congress 2014 (OPIC2014) 国際会議組織委員会委員 (2013–2014).

9th Laser Ceramics Symposium (LCS): International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications 国際会議諮問委員 (2013).

SPIE Photonics Europe 2014 —Laser Sources and Applications (EPE111) 国際会議委員会共同議長 (2013–2014).

応用物理学学会学術講演会プログラム編集委員会委員 (2013–2014).

Materials Committee, Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2014 国際会議プログラム委員会委員 (2013–2014).

Optics & Photonics International Congress 2015 (OPIC2015) 国際会議組織委員会委員 (2014–2015).

大阪大学光科学センター可視光半導体レーザー応用コンソーシアム応用課題検討専門委員会委員 (2014–2016).

10th Laser Ceramics Symposium (LCS2014): International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications 国際会議諮問委員 (2014).

2nd Laser Ignition Conference (LIC' 14) 国際会議プログラム委員会統括議長 (2013–2014).

3rd Pacific-rim Laser Damage (PLD' 14) 国際会議プログラム委員会委員 (2013–2014).

3rd Laser Ignition Conference (LIC' 15) 国際会議プログラム委員会統括議長 (2014–2015).

SPIE Photonics West 2015—Components and Packaging for Laser Systems (Conference 9346) 国際会議プログラム委員会委員 (2014–2015).

SPIE/SIOM Pacific Rim Laser Damage 2015 国際会議国際委員会委員 (2015).

The 11th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PacRim-11), III. NANOTECHNOLOGY AND STRUCTURAL CERAMICS, Symposium 16—Transparent Ceramics 幹事 (2015).

Materials Committee, Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2015 国際会議プログラム委員会委員 (2015).

Nonlinear Optics (NLO) 2015 国際会議諮問委員 (2015).

SPIE Photonics West 2016—Components and Packaging for Laser Systems II (Conference LA105) 国際会議プログラム委員会委員 (2015–2016).

(社) レーザー学会学術講演会第36回年次大会プログラム委員 (担当: B. レーザー装置主査) (2015–2016).

Optics & Photonics International Congress 2016 (OPIC2016) 国際会議組織委員会委員 (2015–2016).

Nonlinear Optics (NLO) 2017 国際会議諮問委員 (2015–2017).

SPIE/SIOM Pacific-Rim Laser Damage (PLD' 16) 国際会議国際委員会委員 (2015–2016).

国立研究開発法人科学技術振興機構革新的研究開発推進プログラム (ImPACT) 評価協力者 (2015–2017).

SPIE/SIOM Pacific Rim Laser Damage 2017 (PLD2017) 国際会議国際委員会委員 (2016–2017).

SPIE Photonics West 2016—Components and Packaging for Laser Systems II (Conference LA105) 国際会議プログラム委員会委員 (2016–2017).

Materials Committee, Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2016 国際会議プログラム委員会委員 (2016).

12th Laser Ceramics Symposium (LCS2016): International Symposium on Transparent Ceramics for Photonic Applications 国際会議プログラム委員会委員 (2016).

Optics & Photonics International Congress 2017 (OPIC2017) 国際会議組織委員会委員 (2016–2017).

The 6th Laser Display and Lighting Conference (LDC2017) 国際会議プログラム委員会委員 (2016–2017).

Advanced Lasers & Photon Sources (APLS'17) 国際会議プログラム委員会委員 (2016–2017).

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 (2006–).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員及び国際事業委員会書面審査員 (2008–2010).

日本学術振興会光エレクトロニクス第130委員会委員 (2007–), 幹事 (2008–).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2011–2013, 2015–2016).

日本学術振興会生体ひかりイメージング技術と応用第185委員会委員 (2011–2017).

学会誌編集委員

Journal of Optical Materials, ELSEVIER, 編集委員会委員 (2010–2013).

Journal of Optical Materials Express, The Optical Society (OSA), シニア編集委員会委員 (2010–2016).

Fibers (<http://www.mdpi.com/journal/fibers>, ISSN 2079-6439), MDPI, 編集委員会委員 (2012–2013).

IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics (JSTQE) on Solid-State Lasers, The Primary Guest Editor for this issue (2013–2015).

Nonlinear Optics (NLO) 2015 Feature Issue, *Opt. Mater. Express* **6**, 466–468 (2016), ゲスト編集委員 (2015–2016).

Advanced Solid State Lasers (ASSL) 2015 Feature Issue, *Opt. Express* **24**, 5674–5682 (2016), ゲスト編集委員 (2015–2016).

その他

愛知県産業労働部愛知県若手奨励賞審査員 (2007–2010).

日本原子力研究開発機構研究系職員採用試験研究業績評価委員会委員 (2008–2011).

日本原子力研究開発機構任期付研究員研究業績評価委員会委員 (2011–2016).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「光エレクトロニクス」, 2016年7月19日, 9月6日.

豊橋技術科学大学, 客員教授, 2016年–.

B-10) 競争的資金

地域新生コンソーシアム, 「ヒートシンクー一体型 Yb:YAG マイクロチップデバイスの開発」, 平等拓範 (2004年–2005年).

NEDO, 「カラーリライタブルプリンタ用高効率小型可視光光源 “Tri Color Laser” の研究開発」, 再委託 (研究代表 リコー) (2004年–2006年).

科学技術振興機構研究成果活用プラザ東海, 実用化のための育成研究, 「光波反応制御内燃機関をめざしたマイクロレーザの研究開発」, 平等拓範 (2006年–2008年).

科学技術振興機構先端計測分析技術・機器開発事業,「イオン化光源としてのマイクロチップレーザーの開発」,再委託(研究代表 東京工業大学)(2007年-2009年).

科研費若手研究(B),「マグネシウム添加タンタル酸リチウムを用いた高効率・高出力中赤外レーザー発生」,石月秀貴(2007年-2008年).

科学技術振興機構産学共同シーズイノベーション化事業,育成ステージ,「車載型マイクロレザ点火エンジンの低燃費・高出力特性の実証研究」,研究リーダー,平等拓範(シーズ育成プロデューサー (株)日本自動車部品総合研究所)(2008年-2011年).

科研費基盤研究(B),「小型可搬な広帯域波長可変中赤外レーザーの開発研究」,平等拓範(2009年-2011年).

科学技術振興機構先端計測分析技術・機器開発プログラム(機器開発タイプ),「次世代質量イメージングのためのUV マイクロチップレーザーを用いた計測システムの開発」,平等拓範(2010年-2013年).

科研費基盤研究(C),「超短パルス発生への適用を目指した傾斜型擬似位相整合デバイスの研究」,石月秀貴(2010年-2012年).

科学技術交流財団平成24年度共同研究推進事業,「エンジン点火用高輝度マイクロチップレーザー」,研究統括者 平等拓範(2012年-2013年).

科研費基盤研究(C),「大口径広帯域擬似位相整合デバイスを用いた高出力超短パルス発生の研究」,石月秀貴(2013年-2015年).

科学技術振興機構先端計測分析技術・機器開発プログラム(実証・実用化タイプ),「次世代質量イメージング用UVマイクロチップレーザー」の実用実証化」,平等拓範(2013年-2015年).

NEDO 戦略的省エネルギー技術革新プログラム,「高性能ジャイアントパルスマイクロチップレーザー (GP-MCL)の開発」,再委託(研究代表 リコー, デンソー)(2013年-2017年).

革新的研究開発推進プログラム(ImPACT)「ユビキタス・パワーレーザーによる安全・安心・長寿社会の実現(佐野PM)」,「マイクロチップレーザーの開発」,平等拓範(2014年-2018年).

科研費基盤研究(A),「マイクロ固体フォトンクスによる次世代レーザー点火・燃焼計測」,平等拓範(2015年-2017年).

文部科学省平成28年度技術試験研究委託事業,「先進的光計測技術を駆使した炉内デブリ組成遠隔その場分析法の高度化研究」,再委託(研究代表原子力機構廃炉国際共同研究センター若井田育夫),平等拓範(2016年-2018年).

B-11) 産学連携

(株)コンボン研究所,「マイクロ固体フォトンクスの基礎研究」,平等拓範(2016年).

三菱電機(株),「高ピーク小型レーザの波長制御技術」,平等拓範(2016年).

ソニー(株),「1.5 μ m 帯高出力マイクロチップレーザーの開発」,平等拓範(2016年).

C) 研究活動の課題と展望

先端的レーザー光源の中で,特にビーム高品質化(空間特性制御)ならびに短パルス化(時間特性制御)などの高輝度化,そしてスペクトルの高純度化を広い波長領域(スペクトル特性制御)でコンパクト化と同時に実現することは,極めて重要な課題である。すでに,マイクロ固体フォトンクスは,医療,バイオ,エネルギー,環境,ディスプレイ,光メモリ分野での展開が図られつつある。特にエネルギー分野からエンジンのレーザー点火への期待は高い。一方で,コヒーレントX線からテラヘルツ波発生,超高速レーザーの極限であるアト秒発生,さらには量子テレポーテーション等の光科学の最先端分野も,このキーワードで深化しつつあり,その学術的拠り所としての基盤構築が必要な時期となっている。

藤 貴 夫（准教授）（2010 年 2 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：量子エレクトロニクス，レーザー物理，非線形光学，超高速分光

A-2) 研究課題：超短光パルスの研究

- a) 超短光パルスの超広帯域波長変換技術を使った分光法の開発
- b) 超短光パルスの位相制御，評価の研究
- c) 赤外ファイバーレーザーの開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 本研究室において，2 から 20 μm までの波長領域で位相の揃ったコヒーレントな赤外光パルスを発生する技術と，そのスペクトルを単一ショット（1 ms）で計測できる方法を開発した。この波長領域の光は，多くの分子振動準位と共鳴しており，非破壊で分子のダイナミクスを研究するのに適している。今年度の成果としては，その高速赤外スペクトル分光法を化学反応ダイナミクスの研究に応用したことである。この装置によって，酢酸とマグネシウムの反応ダイナミクスを，赤外吸収スペクトルの変化によって観測することができた。酢酸とマグネシウムを混合することで，酢酸マグネシウムと水素が発生するが，酢酸の CO 二重結合に由来する吸収線が，反応が進むにつれて減少し，酢酸マグネシウムにおける COO^- の伸縮モードに由来する吸収線が増加する様子がリアルタイムに観測することができた。2 から 20 μm までの波長領域で化学反応ダイナミクスをリアルタイムで計測したのは，世界ではじめてのことである。
- b) 数年前に開発した超短光パルスの光電場波形を直接計測する手法を発展させ，自己参照による光電場波形計測に成功した。パルス幅 21 fs，中心波長 3.3 μm のパルスを二つに分け，その二倍波と自己回折光との干渉信号を測定することで，パルスのキャリア・エンベロープ位相を測定できた。それと同時に，第二高調波周波数分解光ゲート法によって，パルスの強度の時間変化も測定し，それらの情報を組み合わせることで，周期 11 fs で振動する光電場の波形を完全に再現することができた。自己参照によって光電場波形測定ができたことによって，測定したい光電場パルスに対して，測定用に別のパルスを用意する必要がなくなった。このことは，光科学の分野で画期的なことであり，今後の応用が期待される。
- c) 一般的に，波長変換において，変換元と変換先との波長がなるべく近いほうが，変換効率の向上が見込まれる。2–20 μm の赤外光パルス発生において，チタンサファイアレーザーよりも長波長の超短光パルスを波長変換元の光源として使用すれば，より高効率に赤外光パルスを発生できると考えられる。前年度にはトリウム添加フッ化物ファイバーレーザー発振器を開発し，2 μm の波長で 41 fs のパルスを発生させることに成功した。今年度は，そのパルスを増幅するフッ化物ファイバー増幅器を製作した。発振器からの平均出力 36 mW を最大 6.9 W，すなわち約 200 倍に増幅することに成功した。さらに，この出力パルスをパルス圧縮光学系によって圧縮することにより，時間幅が 150 fs のパルスが得られた。一般的には，増幅媒質として，石英ファイバーを用いることがほとんどであるが，本研究では，フッ化物ファイバーを用いることによって，はるかに高い効率で増幅することができた。ZBLAN ファイバーは熱に弱いために増幅器には不向きと考えられてきたが，今回の結果は，超高出力が必要ない場合には ZBLAN ファイバーのほうが増幅に有利であることを意味しており，レーザー増幅のための新たな指針を示すことができた。

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. NOMURA and T. FUJI, “Development of chirped-pulse amplifier based on Thulium-doped ZBLAN fibers,” *EuroPhoton2016*, FWG-5.7 (2016).

P. MALEVICH, C. LIVACHE, Y. NOMURA, A. BALTUŠKA and T. FUJI, “2 mJ ring cavity diode-pumped Tm:YAP regenerative amplifier,” *EuroPhoton2016*, PO-2.6 (2016).

H. SHIRAI, Y. NOMURA and T. FUJI, “Self-Referenced Waveform Measurement of Few-Cycle Mid-Infrared Pulses,” *International Conference on Ultrafast Phenomena 2016*, UTh2A-5 (2016).

T. FUJI, H. SHIRAI and Y. NOMURA, “Self-referenced frequency-resolved optical gating capable of carrier-envelope phase determination,” *CLEO: Science and Innovations 2016*, SM3I-7 (2016).

B-4) 招待講演

T. FUJI, “Sub-cycle mid-infrared pulse generation through filamentation,” COFIL2016, Quebec City (Canada), September 2016.

T. FUJI, “Self-referenced light wave measurement of few-cycle pulses,” International Symposium on Attosecond Science, Tokyo (Japan), July 2016.

T. FUJI, “Self-Referenced Waveform Characterization of Ultrashort Pulses,” LPHYS’16, Yerevan (Armenia), July 2016.

T. FUJI, “Generation and characterization of sub-cycle mid-infrared pulses using THz technologies,” EMN Meeting on Terahertz, San Sebastian (Spain), May 2016.

藤 貴夫, 「Development of infrared ultrafast lasers for molecular science」, 統合バイオリトリート2016, 西尾, 2016年11月.

藤 貴夫, 白井英登, 野村雄高, 「キャリア・エンベロープ位相も決定できる周波数分解光ゲート法」, 第13回エクストリームフォトニクス研究会, 蒲郡, 2016年11月.

藤 貴夫, 「サブサイクル中赤外光パルス発生とその応用」, 第3回超高速光エレクトロニクス研究会, 和光, 2016年4月.

藤 貴夫, 「超短赤外光パルスレーザー光源の最先端」, 高輝度・高強度赤外光源の現状と展望, 岡崎, 2016年2月.

野村雄高, 藤 貴夫, 「2 μ m 帯フェムト秒Tm添加ZBLANファイバレーザ」, レーザー学会学術講演会第36回年次大会, 名古屋, 2016年1月.

藤 貴夫, 「キャリア・エンベロープ位相も測定できる超短光パルス評価法」, レーザー学会学術講演会第36回年次大会, 名古屋, 2016年1月.

野村雄高, 「トリウム添加ファイバレーザによる2 μ m 帯超短パルスレーザーシステム」, 第47回極限コヒーレント光科学セミナー, 柏, 2016年11月.

B-6) 受賞, 表彰

藤 貴夫, 日本光学会奨励賞 (1999).

藤 貴夫, 大阪大学近藤賞 (2008).

藤 貴夫, 野村雄高, 白井英登, レーザー学会業績賞(進歩賞) (2015).

野村雄高, 自然科学研究機構若手研究者賞 (2016).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

CLEO/Europe 2005 座長 (2005).
CLEO/USA 2005 座長 (2005).
CLEO/Europe 2007 国際会議プログラム委員, 座長 (2007).
化学反応討論会実行委員 (2009).
CLEO/Pacific Rim 2009 国際会議プログラム委員, 座長 (2009).
CLEO/Europe 2009 座長 (2009).
ICONO 2010 座長 (2010).
HILAS 国際会議プログラム委員 (2011).
CLEO/Europe 2011 国際会議プログラム委員 (2011).
HILAS 国際会議プログラム委員, 座長 (2012).
COFIL 2012 座長 (2012).
CLEO/USA2013 座長 (2013).
CLEO/Europe2013 国際会議プログラム委員 (2013).
CLEO/Pacific Rim 2013 国際会議プログラム委員, 座長 (2013).
HILAS 国際会議プログラム委員, 座長 (2014).
CLEO/USA2014 国際会議プログラム委員, 座長 (2014).
CLEO/USA2015 国際会議分科プログラム委員長 (2015–2016).
CLEO/Europe2015 国際会議プログラム委員 (2015).
レーザー学会学術講演会第35回年次大会プログラム委員会委員 (2014–2015).
CLEO/USA2015 座長 (2015).
CLEO/Europe2015 座長 (2015).
レーザー学会「ファイバーレーザー技術」専門委員会委員 (2015–). (野村雄高)
CLEO/USA2016 座長 (2016).
CLEO/USA2016 座長 (2016). (野村雄高)

B-8) 大学での講義, 客員

アジアコア冬の学校, 中国科学院化学研究所, 2016年2月27日.
総合研究大学院大学物理科学研究科, 「光物理」, 2016年7月1日–9月30日.

B-10) 競争的資金

(独)理化学研究所研究奨励ファンド, 「搬送波包絡線周波数の安定した超短赤外光パルス発生」, 藤 貴夫 (2006年).
科研費若手研究(A), 「光電子イメージング分光のための10フェムト秒深紫外光パルス発生」, 藤 貴夫 (2007年–2008年).
自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「プラズマを使ったフェムト秒中赤外光パルス発生の研究」, 藤 貴夫 (2010年–2011年).
科研費基盤研究(B), 「超広帯域コヒーレント中赤外光を用いた新しい分光法の開拓」, 藤 貴夫 (2012年–2014年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「超短中赤外パルスを用いた生細胞内分子の無染色ライブイメージング法の開発」, 藤 貴夫 (2012年).

科学技術振興事業団先端計測分析技術・機器開発プログラム要素技術タイプ,「超広帯域コヒーレント赤外分光技術の開発」, 藤 貴夫 (2012年–2015年).

科研費挑戦的萌芽研究,「自己参照による光電場の直接測定」, 藤 貴夫 (2014年–2016年).

科研費特別研究員奨励費,「高次高調波発生による高繰り返し極端紫外光源の開発およびその応用」, 野村雄高 (2010年).

豊秋奨学会海外渡航旅費助成,「153 nmにおけるコヒーレントな高繰り返し準連続光源」, 野村雄高 (2011年).

光科学技術研究振興財団研究助成,「ツリウム添加ファイバーによるフェムト秒レーザーの開発」, 野村雄高 (2012年–2013年).

科研費若手研究(B),「中赤外領域における高繰り返しフェムト秒パルス光源の開発」, 野村雄高 (2013年–2014年).

光科学技術研究振興財団研究助成,「自己参照による光電場波形の直接計測」, 藤 貴夫 (2015年–2016年).

科研費若手研究(B),「単一サイクル赤外光パルスを用いた高速赤外吸収分光」, 白井英登 (2015年–2016年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携プロジェクト,「新規赤外フェムト秒レーザーによる超深部シナプス内分子活性化イメージング」, 藤 貴夫 (2015年–2017年).

天田財団一般研究開発助成,「高出力 2 μ m 超短パルスレーザー光源の開発」, 野村雄高 (2015年–2017年).

科学技術振興機構さきがけ研究「生命機能メカニズム解明のための光操作技術」領域,「長波長レーザーによる超深部顕微分光システムの開発」, 野村雄高 (2016年–2019年).

C) 研究活動の課題と展望

フィラメンテーションを用いた波長変換は、気体を媒質としながらも、高効率な超短光パルスの波長変換法として有効であり、分子研において、この手法による超広帯域コヒーレント赤外光発生を実証してきた。さらに、この光源を使用して、分光を行うことにも成功した。今後も、これらの光源や分光法の特徴をいかし、分子科学の発展や、生物、医療など異分野へ応用していくことを考えている。また、本研究室で独自に開発した新しい光電場波形計測法を用いて、自己参照による光電場波形計測に成功した。この手法によって、光電場波形計測において、波長による制限は原理的に無くなった。これまで、この手法が実証されたのは、赤外光パルスだけであるが、今後、可視光領域でも実証したいと考えている。また、光電場波形に敏感な現象を本手法で観測し、新しい光科学の知見を得ることに期待している。ファイバーレーザーの開発では、ファイバー増幅器の開発に成功した。今後、赤外光発生のためのさらなる増幅や、多光子顕微鏡など、様々な分野へ応用することを考えている。

6-4 物質分子科学研究領域

電子構造研究部門

横 山 利 彦（教授）（2002 年 1 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：表面磁性，X線分光学，磁気光学

A-2) 研究課題：

- a) 雰囲気制御型硬X線光電子分光法の開発と固体高分子形燃料電池への応用
- b) 時間分解X線吸収分光による光触媒のダイナミクス解明
- c) X線吸収分光，X線磁気円二色性などを用いた磁性材料等の構造・物性解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) SPring-8 の BL36XU で新しく開発した雰囲気制御型硬X線光電子分光装置により固体高分子形燃料電池（PEFC）電極触媒の *in situ* 測定を継続して行っている。特に，世界初の完全大気圧（1 気圧）下での光電子分光測定を目指した装置がほぼ完成した。
- b) シンクロトロン放射光とX線自由電子レーザーを用い，光触媒材料の光励起過程での電子状態及び構造ダイナミクスを，X線吸収微細構造（XAFS）分光を用いて明らかにする目的で，ナノ秒（シンクロトロン放射光）あるいはピコ秒（X線線自由電子レーザー）の時間領域での変化を追跡している。
- c) 分子研シンクロトロン放射光施設 UVSOR-III BL4B を用いた高磁場極低温X線磁気円二色性法（XMCD）を共同利用公開し，様々な磁性薄膜の磁気特性検討について国内外との共同研究を広く実施している。また，国内他機関の放射光施設を利用して，様々な磁性錯体等の硬X線 XAFS 測定を行い，局所電子状態・幾何構造解析に関する共同研究を進めている。

B-1) 学術論文

N. ISHIGURO, S. KITAYAKARN, O. SEKIZAWA, T. URUGA, H. MATSUI, M. TAGUCHI, K. NAGASAWA, T. YOKOYAMA and M. TADA, “Kinetics and Mechanism of Redox Processes of Pt/C and Pt₃Co/C Cathode Electrocatalysts in a Polymer Electrolyte Fuel Cell during an Accelerated Durability Test,” *J. Phys. Chem. C* **120**, 19642–19651 (2016). DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b04437

O. SEKIZAWA, T. URUGA, Y. TAKAGI, K. NITTA, K. KATO, H. TANIDA, K. UESUGI, M. HOSHINO, E. IKENAGA, K. TAKESHITA, S. TAKAHASHI, M. SANO, H. AOYAGI, A. WATANABE, N. NARIYAMA, H. OHASHI, H. YUMOTO, T. KOYAMA, Y. SENBA, T. TAKEUCHI, Y. FURUKAWA, T. OHATA, T. MATSUSHITA, Y. ISHIZAWA, T. KUDO, H. KIMURA, H. YAMAZAKI, T. TANAKA, T. BIZEN, T. SEIKE, S. GOTO, H. OHNO, M. TAKATA, H. KITAMURA, T. ISHIKAWA, M. TADA, T. YOKOYAMA and Y. IWASAWA, “SPring-8 BL36XU: Catalytic Reaction Dynamics for Fuel Cells,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **712**, 012142 (4 pages) (2016). doi:10.1088/1742-6596/712/1/012142

S. YAMAZOE, S. TAKANO, W. KURASHIGE, T. YOKOYAMA, K. NITTA, Y. NEGISHI and T. TSUKUDA, “Hierarchy of Bond Stiffnesses within Icosahedral-Based Gold Clusters Protected by Thiolates,” *Nat. Commun.* **7**, 10414 (2016). DOI: 10.1038/ncomms10414

W. -J. CHUN, S. TAKAKUSAGI, Y. UEMURA, K. BANDO and K. ASAKURA, “X-Ray Absorption Fine Structure Analysis of Catalytic Nanomaterials,” *X-Ray and Neutron Techniques for Nanomaterials Characterization*, Springer, 609–664 (2016). DOI: 10.1007/978-3-662-48606-1_11

B-3) 総説, 著書

Y. WAKISAKA, Y. UEMURA, T. YOKOYAMA, H. ASAKURA, H. MORIMOTO, M. TABUCHI, D. OHSHIMA, T. KATO and S. IWATA, “Anomalous Structural Behavior in the Magnetic and Structural Transition of FeRh Thin Films from a Local Viewpoint,” *Photon Factory Highlights 2015*, 32–33 (2016).

高木康多, 「雰囲気制御型硬X線光電子分光による固体燃料電池電極のその場観察」, *表面科学* **37**, 14–18 (2016).

B-4) 招待講演

横山利彦, 「XAFS の解釈」, あいちシンクロtron光センター第5回XAFS グループ利用者研究会, 瀬戸, 2016年 3月.

横山利彦, 「XAFS の解釈」, 日本XAFS 研究会夏の学校, 小樽, 2016年 9月.

T. YOKOYAMA, “Novel synchrotron radiation methodology for materials science,” Pre-ICMM2016 in Nagoya (Satellite meeting of ICMM2016) New Research Crossroads in Molecular Conductors and Magnets, Nagoya, September 2016.

高木康多, 「固体高分子形燃料電池の雰囲気制御型硬X線光電子分光による分析」, 第5回SPRING-8 グリーンサステイナブルケミストリー研究会／第7回SPRING-8先端利用技術ワークショップ, 東京, 2016年 12月.

Y. TAKAGI, “In situ study of oxidation states of platinum nanoparticles on a PEFC electrode by near ambient pressure hard X-ray photoelectron spectroscopy,” KPS Fall meeting 2016, Gwangju (Korea), October 2016.

B-6) 受賞, 表彰

中川剛志, 日本物理学会第4回若手奨励賞 (2010).

高木康多, 日本物理学会第2回若手奨励賞 (2008).

中川剛志, 日本表面科学会第3回若手研究者部門講演奨励賞 (2006).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本XAFS 研究会会長 (2015–).

日本XAFS 研究会幹事 (2001–2007, 2010–2014).

日本放射光学会評議員 (2004–2005, 2008–2010, 2011–2012, 2014–2015).

日本放射光学会編集幹事 (2005–2006).

Executive Committee member of the International X-Ray Absorption Society (2003.7–2009.8).

学会の組織委員等

第14回XAFS 討論会実行委員長プログラム委員長 (2011).

XAFS 討論会プログラム委員 (1998–2016).

第15回X線吸収微細構造国際会議プログラム委員 (2011–2012).

日本放射光学会年会組織委員 (2005), プログラム委員 (2005, 2011).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会学術システム研究センター化学班専門研究員 (2010–2012).

文部科学省ナノテクノロジー・ネットワーク運営委員 (2007–2011).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2004–2005, 2008–2009, 2015).

日本学術振興会科学研究補助金学術創成研究費評価委員 (2008).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験審査委員会実験課題審査部会委員 (2003–2009), 同化学材料分科会主査 (2005–2009).

SPring-8 ユーザー協同体 (SPRUC) 機関代表者 (2012–).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2004–2006).

日本放射光学会誌編集委員長 (2005–2006).

競争的資金等の領域長等

科学研究費補助金特定領域研究「分子スピン」総括班事務局 (2003–2006).

その他

文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォーム分子・物質合成プラットフォーム代表機関運営責任者 (2012–).

文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォーム分子・物質合成プラットフォーム分子科学研究所, 実施機関責任者 (2012–).

文部科学省先端研究施設共用イノベーション創出事業 ナノテクノロジーネットワーク「中部地区ナノテク総合支援：ナノ材料創製加工と先端機器分析」拠点長 (2007.4–2012.3).

名古屋工業大学人事部会外部委員 (2015).

本多記念会本多フロンティア賞選考委員 (2016).

本多記念会本多記念研究奨励賞選考委員 (2012, 2013, 2015).

B-8) 大学での講義, 客員

広島大学大学院理学研究科, 「放射光科学特論Ⅱ」, 2016年 10月 18日–20日.

名古屋大学大学院理学研究科, 客員教授, 2012年–.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(B), 「新規時間分解X線吸収分光法の開発とマイクロ秒電極反応観測への応用」, 上村洋平 (2016年–2017年).

科研費特別研究員奨励費, 「軽元素スピントロニクス材料におけるX線円二色性の解明」, 小出明広 (2015年–2016年).

受託研究, NEDO 固体高分子形燃料電池利用高度化技術開発事業「普及拡大化基盤技術開発」触媒・電解質・MEA 内部現象の高度に連成した解析, セル評価／MEA における性能発現および耐久劣化機構の解析に基づく設計基盤技術の確立／MEA 劣化機構解明, 「雰囲気制御型硬X線光電子分光法を用いた燃料電池触媒の in-situ 状態解析」, 横山利彦 (2015年–2017年).

科研費基盤研究(A) (一般), 「微量元素高速時間分解X線吸収分光の開発と機能性材料への展開」, 横山利彦 (2015年–2017年).

科研費若手研究(A), 「大気圧硬X線光電子分光装置の開発と燃料電池電極触媒のオペランド測定」, 高木康多 (2015年–2016年).

科研費特別研究員奨励費,「時分割DXAFS-PEEMの開発と固体表面上の光励起-電子移動過程の直接観測」, 上村洋平 (2013年).

科研費基盤研究(C),「レーザー誘起磁気円二色性STMによるフタロシアニン分子のスピン分布マッピング」, 高木康多 (2012年-2014年).

受託研究, NEDO 固体高分子形燃料電池実用化推進技術開発「基盤技術開発」MEA 材料の構造・反応物質移動解析,「時空間分解X線吸収微細構造(XAFS)等による触媒構造反応解析」, 横山利彦 (2011年-2014年).

科研費基盤研究(A),「キラル光電子顕微鏡の開発」, 横山利彦 (2010年-2012年).

科研費挑戦的萌芽研究,「レーザー誘起磁気円二色性STMの開発」, 横山利彦 (2008年-2009年).

科研費基盤研究(A),「フェムト秒時間分解紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の開発」, 横山利彦 (2007年-2009年).

科研費若手研究(B),「半導体表面のドーパントの元素識別——放射光STMを用いて——」, 高木康多 (2007年-2009年).

C) 研究活動の課題と展望

2002年1月着任以降, 磁性薄膜の表面分子科学的制御と新しい磁気光学分光法の開発を主テーマとして研究グループをスタートさせた。磁性薄膜・ナノワイヤ・ナノドットの磁氣的性質, および分子吸着などの表面化学的な処理による新しい現象の発見とその起源の解明などを旨とし, 超高真空表面磁気光学 Kerr 効果法, 高磁場 (7 T) 極低温 (5 K) X線磁気円二色性法 (UVSOR 利用), 磁氣的第二高調波発生法 (フェムト秒 Ti:Sapphire レーザー使用), 極低温超高真空走査トンネル顕微鏡などの手法を展開してきた。また, 紫外光励起光電子放出による磁気円二色性が仕事関数しきい値近傍で極端に増大する現象を発見し, 紫外磁気円二色性光電子顕微鏡を世界に先駆けて開発し, さらにはこれまで全く研究されていなかった二光子光電子磁気円二色性法の初観測に成功し, 極めて有効な手法として今後の発展が期待できることが示された。現在, 薄膜・表面磁性研究は UVSOR-III での X線磁気円二色性を用いた共同研究のみを継続しており, 装置が安定に順調に運転されているため次年度以降も精力的に共同研究を進める。

2011年度から, 広域X線吸収微細構造 (EXAFS) 法と経路積分法を併用して, インバー等磁性合金の熱膨張等の研究を始め, 既にプレスリリース2件を含めて十分な成果が挙がっている。今後も, この独自の手法によって, 局所構造の見地から固体の熱的性質を検討していく。

2011年度から, SPring-8 の超高輝度硬X線を利用した燃料電池の in situ 雰囲気制御型硬X線光電子分光による解析を行ってきた。2017年度は, 開発した光電子分光システムの当初最大圧力 (~5000 Pa) をほぼ大気圧の 90,000 Pa にまで引き上げて光電子分光観測に成功した。今後, より実際の動作に近い圧力下での燃料電池電極状態観測に適用できる。光電子分光は, 燃料電池中の各構成成分の電位を電極なしに観測可能な手法であり, これらの観測を進めている。さらに, 測定には通常 20 分程度要するが, 急激な燃料電池の電圧変化追跡等のため, 繰返し計測のもと 200 ms の実効時間分解計測が可能となった。

2013年度から, シンクロトロン放射光やX線自由電子レーザーを用いたナノ・ピコ秒時間分解X線吸収微細構造分光法の開発的研究を進め, 光触媒等の高速時間依存電子状態・幾何構造の変化を追跡する研究を行っている。これまでの高速時間分解X線吸収分光測定は, ポンプレーザーとプローブX線の繰返し周波数の大きな相違に基づくパルスピッキングの必要性から, 高速で低エネルギー分解能のX線検出器の利用を余儀なくされており, そのため測定試料が高濃度に限られていた。現在, Photon Factory Advanced Ring のシングルバンチ運転と高繰返しレーザーを完全同期させ, 高エネルギー分解能X線検出器を用いた超微量元素の高速時間分解X線吸収分光法を開発中である。また, シングルバンチ等の特殊運転を必要としないタイムスタンプ法時間分解 XAFS 測定 (ns ~ μ s の変化が対象) の構築を進めている。

電子物性研究部門

中 村 敏 和（准教授）（1998 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：物性物理学，物質科学，磁気共鳴

A-2) 研究課題：

- a) 磁気共鳴法による有機導体・低次元スピン系の電子状態理解
- b) パルスおよび高周波 ESR を用いたスピン科学研究の新しい展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機導体・低次元スピン系の特異な電子状態に興味を持ち，微視的な観点からその電子状態やスピン・電荷ダイナミクスを明らかにするために磁気共鳴測定を行っている。一次元電子系の競合電子相の起源に迫るために，4 GPa に迫る系統的な超高圧力下の NMR 測定ならびにパルス ESR を行い，リエントラント反強磁性相や量子臨界点の是非，電荷秩序相と基底状態の相関について研究を行っている。この他，新規な自己ドーピング型有機導体の強磁場 ESR を用いた研究，新規な金属錯体や導電性分子物質に関する微視的研究も行っている。
- b) 分子研所有のパルスおよび高周波 ESR を用いて，高分解能 ESR・高エネルギー特性を利用した複雑なスピン構造の決定，多周波領域にわたるスピンドイナミクス計測といった種々な点から，スピン科学研究展開を行っている。本年度は Q-band の多重パルスシステムも稼働した。今後さらに，当該グループだけでなく所外の ESR コミュニティーと連携を取り，パルス・高周波 ESR の新たな可能性や研究展開を議論し，大学共同利用機関である分子研からのスピン科学の情報発信を行っていく。

B-1) 学術論文

K. MATSUBARA, Y. FUKAHORI, T. INATOMI, S. TAZAKI, Y. YAMADA, Y. KOGA, S. KANEGAWA and T. NAKAMURA, “Monomeric Three-Coordinate N-Heterocyclic Carbene Nickel(I) Complexes: Synthesis, Structures, and Catalytic Applications in Cross-Coupling Reactions,” *Organometallics* **35**, 3281–3287 (2016).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

T. NAKAMURA, “Pulsed and multi-frequency ESR study for material and biological sciences,” International Workshop “Novel Magnetic Resonance Techniques in Millimeter and Terahertz Waves and their Applications to Bioscience (MR-THz2016),” Kobe University, Kobe (Japan), November 2016.

T. NAKAMURA, “Magnetic Resonance Investigation for Molecular Based Conductors,” IGER International Symposium on Science of Molecular Assembly and Biomolecular Systems 2016, Nagoya University, Nagoya (Japan), September 2016.*

T. NAKAMURA, “Pulsed ESR Study on Material and Biofunctional Spin Science,” The 4th Awaji International Workshop on Electron Spin Science & Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications (AWEST2016), Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji (Japan), June 2016.

B-6) 受賞, 表彰

中村敏和, 科研費審査委員の表彰 (2015).

古川 貢, 電子スピンスイエンズ学会奨励賞 (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域7世話人 (2000–2001).

日本物理学会代議員 (2001–2003).

日本物理学会名古屋支部委員 (2001–2007, 2013–).

日本化学会実験化学講座編集委員会委員 (2002).

電子スピンスイエンズ学会担当理事 (2004–2005).

電子スピンスイエンズ学会運営理事 (2006–2011).

電子スピンスイエンズ学会副会長 (2014–2015).

電子スピンスイエンズ学会会長 (2016–).

アジア環太平洋EPR/ESR 学会 (Asia-Pacific EPR/ESR Society) 秘書／財務 (2004–2008), 日本代表 (2010–2014).

日本化学会化学便覧基礎編改訂6版編集委員会委員 (2015–2018).

学会の組織委員等

Asia-Pacific EPR/ESR Symposium 2006, Novosibirsk, Russia, International Organizing Committee, 組織委員 (2006).

分子構造総合討論会2006 (静岡), プログラム委員 (2006).

A Joint Conference of the International Symposium on Electron Spin Science and the 46th Annual Meeting of the Society of Electron Spin Science and Technology (ISESS-SEST2007) Shizuoka, Japan Organizing Committee, 組織委員 (2007).

Asia Pacific EPR Society—EPR Symposium 2008, Cairns, Queensland, Australia, International Advisory Committee, 組織委員 (2008).

第3回分子科学討論会2009 (名古屋), プログラム委員 (2009).

第49回電子スピンスイエンズ学会年会 (名古屋), プログラム委員 (2010).

Asia Pacific EPR/ESR Symposium 2012, Oct. 11th–15th, 2012, Beijing, China, International Organizing Committee, 組織委員 (2012).

Joint Conference of APES2014, IES and SEST2014 (APES-IES-SEST2014), Nov. 12th–16th, 2014, Nara, Japan, プログラム委員長, 座長 (2014).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

東京大学物性研究所物質合成・設備共同利用委員会委員 (2005–2007).

東京大学物性研究所物質設計評価施設運営委員会委員 (2011–2013).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2013–2015).

学会誌編集委員

電子スピンスイエンズ学会編集委員 (2003).

電子スピンスイエンズ学会編集委員長 (2004–2005).

電子スピンスイエンズ学会編集アドバイザー (2006–2013).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「先端磁気共鳴計測による電子対相関の解明」, 中村敏和 (2013年–2015年).

科研費挑戦的萌芽研究,「パルスESRによる距離計測技術を用いたプリオン凝集体構造の解明」, 中村敏和 (2012年–2013年).

科研費基盤研究(B),「低次元系の特異な電子相を利用したデバイス創製ならびにスピンドYNAMIX研究」, 中村敏和 (2008年–2011年).

科研費特定領域研究「100テスラ領域の強磁場スピン科学」(公募研究),「シアノバクテリア由来光化学II複合体の高磁場ESRによる研究」, 中村敏和 (2008年–2009年).

科研費特定領域研究,「分子導体における電荷の遍歴性と局在性の研究」, 代表者 薬師久弥(中村敏和は準代表者で実質独立)(2003年–2007年).

C) 研究活動の課題と展望

本グループでは、分子性固体の電子状態(磁性、導電性)を主に微視的な手法(ESR, NMR)により明らかにしている。有機導体など強相関低次元電子系の未解決な問題の解明を行うとともに、生体関連試料を含む分子性物質の機能性に関する研究を行っている。多周波ESR (X-, Q-, W-bands)・パルス二重共鳴法(ELDOR, ENDOR)を用いた他に類を見ない磁気共鳴分光測定を中心に多数の協力研究・共同研究を受け入れ、最先端のESR測定研究の展開を全世界に発信している。今後は高圧下・極低温下といった極端条件での測定システム構築を行うとともに、分子科学における磁気共鳴研究のあらたな展開を行っていく。

分子機能研究部門

平 本 昌 宏（教授）（2008 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機半導体，有機太陽電池，有機エレクトロニクスデバイス

A-2) 研究課題：

- a) 有機半導体単結晶におけるドーピング効果
- b) 横取り出し超格子有機単結晶太陽電池の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 10^{-9} nm/s に達する超低速蒸着技術を開発し、ルブレノ有機単結晶へ 1 ppm まで極微量ドーピングすることに成功した。ホール効果測定によって、有機単結晶は、有機アモルファス薄膜の 3% にくらべて、格段に大きいドーピングイオン化率 27% を示すことが明らかになった。電界効果（FET）移動度測定によって、ドーピングによって有機単結晶中に形成される欠陥によるトラップが、キャリア濃度、キャリア移動度に大きな影響を与えていることが明らかになった。以上の結果は、有機単結晶エレクトロニクス分野を開拓する基礎となる成果である。
- b) 超高速ホール移動度有機半導体と超高速電子移動度有機半導体を用いたキャリアハイウェー単結晶膜を、サファイア単結晶基板上にエピタキシー技術によって作製し、さらに、両者の交互積層超格子構造を持つ、キャリア横取り出し型超格子単結晶セルを作製した。このセルにおいて、光生成電子・ホールを、約 1 ミリメートルの距離で横方向に取り出すこと、および、励起子拡散効率とキャリア収集効率を両立させて 100% とすることに成功し、ブレンド接合が不必要な新しいタイプの単結晶超格子有機太陽電池の原理を実証できた。
本セルは、キャリアを横取り出しするため、いくらでも厚く積層できるので、これまでの有機太陽電池のスタンダードであったブレンド接合の限界を打ち破ることができ、可視光全域を利用することで、15% 以上の効率を示す可能性を持つと考えている。

B-1) 学術論文

Y. WATANABE, T. HARADA, H. KAWAI, T. KAJI, M. HIRAMOTO and K. NISHIYAMA, “Emission Properties of [Eu(hfa)₃(phen)] and [Eu(hfa)₃(TPPO)₂] Dispersed in a Fibrous Network Comprising *p*-Chlorophenol + AOT Organogels,” *J. Mol. Liq.* **217**, 51–56 (2016).

S. KATSUBE, M. KINOSHITA, K. AMANO, T. SATO, Y. KATSUMOTO, T. UMECKY, T. TAKAMUKU, T. KAJI, M. HIRAMOTO, Y. TSURUNAGA and K. NISHIYAMA, “Solvent Dependent Properties and Higher-Order Structures of Aryl Alcohols + AOT Molecular Gels,” *Langmuir* **32**, 4352–4360 (2016).

B-3) 総説，著書

平本昌宏, 「ppm ドーピングによる有機半導体のpn 制御と有機太陽電池応用」, 「機能性色素の新規合成・実用化動向」, 松居正樹監修, シーエムシー出版(株), 第2章第1節, pp. 151–167 (2016).

B-4) 招待講演

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” PACCON 2016, Pure and Applied Chemistry International Conference 2016, The 4th CU-IMS Symposium: 10 Years of Fruitful Relationship and Beyond (IMS), Bangkok (Thailand), February 2016.

M. HIRAMOTO, “Recent Progress and Future of Organic Photovoltaic Cells,” Japan Society of Applied Physics, Symposium 4 “Recent Progress of Organic Electronics in Japan and Korea: For the Next Jump,” Tokyo Institute of Technology, Tokyo, March 2016.

M. HIRAMOTO, “Bandgap Science for Organic Solar Cells,” 2nd World Congress on Materials Science, Polymer Engineering, Microtechnologies, Oil, Gas and Petrochemistry, Abu Dhabi (U.A.E.), November 2016.

平本昌宏, 「有機半導体のpn制御と有機太陽電池への応用」, 第63回応用物理学会春季学術講演会シンポジウム19「有機薄膜太陽電池の現状と今後の展望」, 東京工業大学大岡山キャンパス, 東京, 2016年3月.

平本昌宏, 「有機単結晶薄膜太陽電池」, 第12回有機太陽電池シンポジウム——ペロブスカイト太陽電池の研究展開と有機薄膜太陽電池のポテンシャル——, 京都大学宇治キャンパス, 宇治, 2016年7月.

平本昌宏, 「有機半導体のpn制御と有機太陽電池への応用」, 有機エレクトロニクスデバイス・材料に関する研究討論会, 大阪大学吹田キャンパス銀杏会館, 吹田, 2016年9月.

平本昌宏, 「有機半導体のpn制御と有機太陽電池への応用」, 名古屋大学工学研究科応用物理学専攻談話会, 名古屋大学3号館, 名古屋, 2016年11月.

B-5) 特許出願

「横方向キャリア収集型有機太陽電池」, 平本昌宏, 菊地満, 新村祐介, 廣田真樹, 阿部正宏, 貞光雄一, 内藤裕義(日本化薬株式会社, 自然科学研究機構, 大阪府立大学), 2016年.

B-6) 受賞, 表彰

嘉治寿彦, 応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会奨励賞 (2013).

嘉治寿彦, 第31回(2011年秋季)応用物理学会講演奨励賞 (2011).

平本昌宏, 国立大学法人大阪大学教育・研究貢献賞 (2006).

平本昌宏, 応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会論文賞 (2006).

平本昌宏, JJAP(Japanese Journal of Applied Physics) 編集貢献賞 (2004).

平本昌宏, 電子写真学会研究奨励賞 (1996).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会幹事 (1997–1998, 2001–2002).

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会年会講演プログラム委員 (2002–2003).

Korea-Japan Joint Forum (KJF)—Organic Materials for Electronics and Photonics, Organization Committee Member (2003–).

「有機固体における伝導性・光伝導性および関連する現象」に関する日中合同シンポジウム組織委員 (2007–).

応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会年会講演プログラム委員長 (2008–2009).

Fifth International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE5)(Miyazaki), Organization Committee Member (2009).

東京大学物性研究所2011年度後期短期研究会「エネルギー変換の物性科学」オーガナイザーメンバー (2011).

有機薄膜太陽電池サテライトミーティング世話人代表 (2009–2014).

The 37th International Symposium on Compound Semiconductors (ISCS2010), Programm Committee Member of the Session “Organic Semiconductor Materials and Devices,” 31 May–4 June 2010, Takamatsu Kagawa, Japan (2010).

The 40th International Symposium on Compound Semiconductors (ISCS 2013), Program Committee Member, “Organic Semiconductors and Flexible Materials,” Kobe Convention Center, Kobe, Japan, May 19–23 (2013).

The 6th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion (WCPEC-6), Program Committee Member and Chairman, Kyoto International Conference Center, Kyoto, Japan, Nov. 23–27 (2014).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術交流財団(財)「有機半導体の基礎科学と有機太陽電池への応用に関する研究会」座長 (2009–2011).

ERATO (戦略的創造研究推進事業) 追跡評価評価委員(評価委員長: 阿知波首都大学東京名誉教授)(中村活性炭素クラスタープロジェクト(2004–2009) 追跡評価) (2015.7–10).

NEDO (新エネルギー・産業技術総合開発機構)「次世代材料評価基盤技術開発／有機薄膜太陽電池材料の評価基盤技術開発」研究評価委員会(分科会)委員(中間評価) (2015.8.19–11.4).

学会誌編集委員

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌編集委員 (2001–2002, 2004–2007).

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌ゲストエディター (2005).

競争的資金等の領域長等

東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究「有機半導体デバイスの基礎と応用」研究代表者 (2003–2005).

さきがけ「太陽光と光電変換」研究領域 領域アドバイザー (2009–).

戦略的創造研究推進研究(CREST)「低エネルギー, 低環境負荷で持続可能なものづくりのための先導的な物質変換技術の創出(ACT-C)」研究領域 領域アドバイザー (2012–).

その他

京都大学化学研究所全国共同利用・共同研究拠点連携基盤専門小委員会委員 (2011–2012).

岡崎ビジネス大賞評価委員 (2012).

岡崎ものづくり協議会学識委員 (2011–).

B-8) 大学での講義, 客員

大阪大学ナノ高度学際教育研究訓練プログラムナノ社会人教育夜間講義, 大阪大学中之島センター, 「有機太陽電池(I)(II)」, 2016年1月5日.

名古屋大学大学院工学研究科, 集中講義「有機半導体を用いた太陽電池」, 2016年11月4日, 11月25日, 12月9日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C)(2),「高効率有機3層接合型固体太陽電池の開発」, 平本昌宏 (2006年–2007年).

科研費基盤研究(C)(2),「垂直接合型有機固体太陽電池の開発」, 平本昌宏 (2004年–2005年).

科学技術振興機構シーズ育成試験,「p-i-n 接合型有機固体太陽電池」, 平本昌宏 (2005年).

科学技術振興機構産学共同シーズイノベーション化事業顕在化ステージ,「高効率有機固体太陽電池の実用化試験」, 平本昌宏 (2006年–2007年).

科学技術戦略推進機構アカデミアショーケース研究助成,「p-i-n 有機太陽電池の開発」, 平本昌宏 (2006年).

(財)関西エネルギー研究基金(KRF) 助成,「有機半導体のpn 制御とp-i-n 有機固体太陽電池の開発」, 平本昌宏 (2006年).

NEDO「太陽光発電システム未来技術研究開発」,「超階層ナノ構造を有する高効率有機薄膜太陽電池の研究開発」, 平本昌宏(分担) (2006年度–2009年度).

科学技術振興機構CREST 研究,「二酸化炭素排出抑制に資する革新的技術の創出」,「有機薄膜太陽電池の高効率化に関する研究」, 平本昌宏(分担) (2008年度–2009年度).

科研費基盤研究(B)(2),「有機半導体のイレブンナイン超高純度化による 10% 効率有機薄膜太陽電池の開発」, 平本昌宏 (2009年–2012年).

科研費挑戦的萌芽研究,「直立超格子ナノ構造を組み込んだ高効率有機太陽電池」, 平本昌宏 (2009年–2010年).

科研費挑戦的萌芽研究,「クロスドーピングによる有機薄膜太陽電池」, 平本昌宏 (2012年–2013年).

科学技術振興機構CREST 研究,「太陽光を利用した独創的クリーンエネルギー生成技術の創出研究領域」,「有機太陽電池のためのバンドギャップサイエンス」, 平本昌宏 (2009年–2015年).

科研費基盤研究(B),「共蒸着膜のpn 制御による 15% 効率有機タンデム太陽電池の開発」, 平本昌宏 (2013年–2016年).

NEDO (新エネルギー・産業技術総合開発機構), エネルギー・環境新技術先導プログラム「pn 制御有機半導体単結晶太陽電池の開発」, 平本昌宏, (2015年–2016年).

B-11) 産学連携

日本化薬(株),「超高速移動度有機半導体単結晶の研究」, 平本昌宏 (2016年).

C) 研究活動の課題と展望

伊澤誠一郎氏が, 新しい助教として4月1日付で着任した。NEDO エネルギー・環境新技術先導プログラム「pn 制御有機半導体単結晶太陽電池の開発」(代表: 平本, 分担: 伊崎(豊橋技科大), 内藤(大阪府大), 池田(日本化薬(株)))の遂行のために, 研究員3名(新村, 菊池, 廣田)を雇用した。また, 博士課程学生2名(大橋(D 3), 新宅(D 2)), タイ国マヒドール大, Thidarat Kunawong (D2, 2015.11–2016.3)が在籍している。

NEDO プロジェクト(2015.3–2016.2)では, 超高性能単結晶有機太陽電池の原理と実際の動作を実証した。先のCREST プロジェクトによって開拓した有機pn 制御技術とあわせて, 今後, 有機単結晶エレクトロニクス分野を開拓する。

2週に1度, 1日かけて研究報告とディスカッションを強力に行っている。継続性のため, 新たな学生を確保することが重要な課題となっている。

西 村 勝 之 (准教授) (2006 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：固体核磁気共鳴，構造生命科学

A-2) 研究課題：

- a) 糖鎖脂質含有二重膜表面で誘起されるアミロイド β 会合状態の固体 NMR を用いた構造解析
- b) 固体 NMR を用いた有機・無機分子材料の解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) アミロイド β ペプチド ($A\beta$) はアルツハイマー病の原因分子と考えられ，凝集して不溶性のアミロイド線維を形成するが，近年，この線維化が細胞膜上で促進されと考えられている。本研究では，脂質膜上で形成される $A\beta$ 会合中間体を補足し，構造解析を行うことにより，脂質膜上でのアミロイド線維形成機構の解明を行うことを目的として，分子研の加藤（晃）先生のグループと共同研究を行ってきた。初期検討として $A\beta$ と弱い相互作用を有する中性脂質二重膜表面に結合して誘起される $A\beta_{40}$ の会合状態の解析を固体 NMR を用いて行い，その会合中間体の立体構造解析に成功した (*PLoS One* 2016)。さらに，より生理条件に近い細胞膜モデルとなる糖脂質含有脂質二重膜上に結合した $A\beta$ 試料の線維化前会合状態を固体 NMR を用いて解析している。これまで調製した試料では，極性頭部の大きい糖脂質の含有により試料中の有効ペプチド濃度が低く，信号帰属に必要な一連の2次元相関 NMR で十分なスペクトル感度の確保が困難であった。本年度，試料調製法を大幅に変更し，試料中の有効ペプチド濃度の増強，さらに固体 NMR 測定法の改良により，顕著な感度向上に成功した。現在，信号帰属に必要な一連の測定および解析を行っている。
- b) 有機溶剤に不溶な非晶性の有機分子材料の状態解析は有効な手段が少なく，固体 NMR は非破壊でその分子情報を得ることが可能な有効な手段の一つである。これまで，所内外の複数の研究グループとの共同研究として，固体 NMR を用いて複数の新規合成高分子，分子材料，および高分子複合体などの分子状態，および構造解析を行ってきた。北陸先端大学院大学の江先生のグループとの共同研究として，同グループで新規合成された高分子の分子状態の解析を行った (*Nat. Commun.* 2016)。さらに，山形大学の飯島先生との共同研究として，無機材料の分子状態解析 (*Solid State Nucl. Magn. Reson.* 2016) を行った。さらに，所外の3研究グループと，有機分子材料の固体 NMR を用いた構造解析に関して共同研究を継続中である。

B-1) 学術論文

M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and K. NISHIMURA, “Membrane-Induced Dichotomous Conformation of Amyloid β with the Disordered N-Terminal Segment Followed by the Stable C-Terminal β Structure,” *PLoS One* **11**, 0146405 (10 pages) (2016).

T. IJIMA, T. YAMASE and K. NISHIMURA, “Molecular and Electron-Spin Structures of a Ring-Shaped Mixed-Valence Polyoxovanadate (IV, V) Studied by ^{11}B and ^{23}Na Solid-State NMR Spectroscopy and DFT Calculations,” *Solid State Nucl. Magn. Reson.* **76–77**, 15–23 (2016).

N. HUANG, L. ZHAI, D. E. COUPRY, M. A. ADDICOAT, K. OKUSHITA, K. NISHIMURA, T. HEINE and D. JIANG, “Multiple-Component Covalent Organic Frameworks,” *Nat. Commun.* **7**, 12325 (12 pages) (2016).

B-6) 受賞, 表彰

西村勝之, 日本核磁気共鳴学会 優秀若手ポスター賞 (2002).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本核磁気共鳴学会評議員 (2009–2010, 2013–2014).

日本核磁気共鳴学会選挙管理委員 (2005).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2004–2009).

学会の組織委員等

第27回生体系磁気共鳴国際会議 (ICMRBS) 実行委員, プログラム委員 (2013–2016).

第51回NMR 討論会プログラム委員 (2012).

学会誌編集委員

日本生物物理学会欧文誌 *Biophysics*, Advisory board (2005–2009).

Global Journal of Biochemistry, Editorial Board (2010–2013).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「脂質膜を介した生体超分子構造形成機構の解析に資する固体NMR 測定法開発と適用」, 西村勝之 (2016年–2018年).

科研費基盤研究(C), 「非標識固体試料解析のための固体NMR 新規測定法開発」, 西村勝之 (2013年–2015年).

科研費基盤研究(C), 「固体NMR による新規室温磁場配向膜を用いた膜表在性タンパク質脂質結合機構の解明」, 西村勝之 (2010年–2012年).

科研費萌芽研究, 「試料状態変調型固体NMR プローブ開発とその適用」, 西村勝之 (2008年–2009年).

(財) 新世代研究所研究助成, 「生体含水試料のための低発熱型新規固体NMR ナノ構造解析法開発」, 西村勝之 (2005年).

科研費若手研究(B), 「脂質膜結合生理活性ペプチド立体構造解析のための低発熱型固体NMR 測定法開発と適用」, 西村勝之 (2004年–2005年).

B-11) 産学連携

(株) 新日鉄住金化学, 「炭素材料の構造解析」, 西村勝之 (2016年).

C) 研究活動の課題と展望

しばらくの間一人で研究を行ってきた。昨年度着任した特任助教は同年度内で退職し、現在また一人で研究を行っている。所内外の複数の研究グループと共同研究を行っているが、解析対象の試料調製など人手が必要ため、メンバーの増員が必要であると考えている。生体分子に加え、所外からの分子材料の構造解析の依頼もあり、これらを対象とした測定法の開発研究も進めている。昨年度、念願だった当グループNMR 分光器の更新が叶ったが、測定に必要な固体NMR プローブは、本年度購入を行っており、稼働は年度末となる予定である。今後、共通機器で共同研究の測定を行いつつ、開発研究をグループ所有の分光器で行うことで、さらに研究を加速させたいと考えている。

6-5 生命・錯体分子科学研究領域

生体分子機能研究部門

青 野 重 利（教授）（2002 年 5 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：生物無機化学

A-2) 研究課題：

- a) 新規なセンサー型転写調節因子の構造と機能に関する研究
- b) 細菌のヘム取り込み反応に関与するタンパク質の構造機能相関解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) *Thermus thermophilus* に含まれる CarH は、カロテノイド色素合成酵素の発現を光依存的に制御している転写調節因子であり、ビタミン B12（アデノシルコバラミン）を光受容体として利用している新規な光センサータンパク質である。暗所で調製したアデノシルコバラミン結合型 CarH（AdoCbl-CarH）は、四量体構造を有しているが、これに可視光を照射すると単量体へと解離した。光照射による四量体から単量体への高次構造変化は不可逆的な変化であり、光照射後のサンプルを暗所に戻しても四量体へと戻ることはなかった。CarH による光センシング、および光による CarH の機能制御の分子機構を明らかにするため、CarH の結晶構造解析を行い、暗所で調製した AdoCbl-CarH の結晶構造解析に成功した。得られた結晶構造中で CarH は四量体を形成しており、CarH プロトマーは三つのドメイン（N 末端側から順に DNA 結合ドメイン、helix-bundle ドメイン、Rossman-fold ドメイン）から構成されていた。アデノシルコバラミンは、helix-bundle ドメインと Rossman-fold ドメインに挟まれる形で結合しており、Rossman-fold ドメイン中の His177 が第 6 配位子としてコバルトに配位していた。アデノシル基は、helix-bundle ドメイン中の二本のヘリックスに挟まれて存在しており、Trp131 と His142 がアデノシル基周辺に位置することにより、その配向を制御していると推定された。CarH が光を感知すると、アデノシル基が光解離することにより、コバラミン周辺のコンフォメーションが変化し、その結果として四量体から単量体への高次構造変化が誘起されるものと考えられる。
- b) コリネバクテリア中に含まれるヘム取り込み系は、コリネバクテリアの細胞表層に存在し、ヘムの結合・輸送に関与する HtaA-HtaB タンパク質と、細胞内へのヘム輸送に関与する HmuT-HmuU-HmuV タンパク質から構成されている。今年度の研究では、細胞表層に存在するヘム輸送タンパク質 HtaA の N 末ドメイン（HtaA-N）の結晶構造決定に成功した。HtaA-N は 11 本の β -strand と 2 本の短い α -helix から構成されており、HtaA-N 1 分子あたりにヘム 1 分子が結合していた。分子表面近傍に、 β -strand 間を繋ぐ二つのループ領域がヘム分子を挟み込むように存在し、疎水性アミノ酸が豊富なポケット中にヘムが結合していた。ヘム鉄は Tyr58 を軸配位子とする 5 配位構造をとっていた。Tyr58 のヒドロキシ酸素は、近傍の His111 のイプシロン位の窒素と水素結合を形成していた。HtaA-N と HtaA の C 末ドメイン（HtaA-C）および HtaB のアミノ酸配列を比較すると、HtaA-N においてヘム結合ポケットを形成する疎水性アミノ酸や、ヘム鉄の軸配位子である Tyr58、Tyr58 と水素結合している His は、HtaA-C、HtaB の対応する位置に保存されていた。このことから、HtaA-N、HtaA-C、HtaB は共通の構造基盤を有するヘム結合・輸送タンパク質であると考えられる。HtaA-N と共通のフォールディングを有する既知のヘム結合タンパク質は存在しなかった。しかしながら、これまでに報告されているヘム輸送タンパク質中に存在するヘム結合ドメイン（NEAT ドメイン）と

HtaA-N との間には、いくつかの共通する性質が見られた。HtaA-N と NEAT ドメインでは、アミノ酸配列の相同性はないが、 β シート構造を骨格としているという共通点があった。また、ヘム結合部位に着目すると、いずれも Tyr がヘムの軸配位子として機能しており、軸配位子である Tyr は近傍の残基と水素結合を形成している。この水素結合は、ヘム取込み系で機能するタンパク質に共通の構造基盤であると考えられ、ヘムの結合親和性の制御に寄与していると推定される。

B-1) 学術論文

N. MURAKI and S. AONO, “Structural Basis for Heme Recognition by HmuT Responsible for Heme Transport to the Heme Transporter in *Corynebacterium glutamicum*,” *Chem. Lett.* **45**, 24–26 (2015).

N. MURAKI, C. KITATSUJI, M. OGURA, T. UCHIDA, K. ISHIMORI and S. AONO, “Structural Characterization of Heme Environmental Mutants of CgHmuT that Shuttles Heme Molecules to Heme Transporters,” *Int. J. Mol. Sci.* **17**, 829 (10 pages) (2016).

A. OTOMO, H. ISHIKAWA, M. MIZUNO, T. KIMURA, M. KUBO, Y. SHIRO, S. AONO and Y. MIZUTANI, “A Study of the Dynamics of the Heme Pocket and C-Helix in CooA Upon CO Dissociation Using Time-Resolved Visible and UV Resonance Raman Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. B* **120**, 7836–7843 (2016).

T. NAKAE, M. HIROTSU, S. AONO and H. NAKAJIMA, “Visible-Light-Induced Release of CO by Thiolate Iron(III) Carbonyl Complexes Bearing N,C,S-Pincer Ligands,” *Dalton Trans.* **45**, 16153–16156 (2016).

B-4) 招待講演

S. AONO, “Structure and Function of Heme Acquisition System in *Corynebacterium glutamicum*,” 229th The Electrochemical Society Meeting, San Diego (U.S.A.), May 2016.

S. AONO, “Structural Basis for Heme Acquisition in *Corynebacterium glutamicum*,” 9th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-9), Nanjing (China), July 2016.

S. AONO, “New Functions of Heme: Sensing and Signaling in Biological Systems,” 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.

N. MURAKI, “Structural Analysis of a Novel Heme Acquisition Protein, Heme Transport-Associated (Hta) Family,” 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.

S. AONO, “Structural Basis for the Molecular Mechanism of Heme Acquisition in *Corynebacterium glutamicum*,” 8th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference, Auckland (New Zealand), December 2016.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

触媒学会生体関連触媒研究会世話人 (2002–).

日本化学会生体機能関連化学部会幹事 (2007–2014).

日本化学会東海支部常任幹事 (2009–2010).

日本化学会生体機能関連化学・バイオテクノロジーディビジョン幹事 (2014–2015).

日本化学会生体機能関連化学・バイオテクノロジーディビジョン主査 (2016–).

学会の組織委員等

14th International Conference on Biological Inorganic Chemistry 組織委員会総務委員長 (2009).

The first International Symposium on Biofunctional Chemistry 組織委員 (2012).

Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations 組織委員 (2008–2010, 2012–2016).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2005–2007).

日本学術振興会国際事業委員会書面審査員 (2005–2007).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2010–2012, 2014–2015).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員及び国際事業委員会書面審査委員・書面評価員 (2016–2017).

大阪大学蛋白質研究所専門委員会委員 (2016–).

学会誌編集委員

J. Biol. Inorg. Chem., Editorial Advisory Board (2002–2004).

Biosensors, Editorial Board (2010–).

Chemistry Letters, Section Editor (2013–).

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究(公募研究), 「タンパク質配位空間を利用した気体分子センシングとシグナル伝達」, 青野重利 (2005年–2007年).

内藤記念科学振興財団内藤記念科学奨励金(研究助成), 「気体分子による生体機能制御のケミカルバイオロジー」, 青野重利 (2006年).

倉田記念日立科学技術財団倉田奨励金(研究助成), 「一酸化炭素, 一酸化窒素, 酸素による遺伝子発現制御の分子機構」, 青野重利 (2006年).

科研費基盤研究(B), 「気体分子を生理的エフェクターとする金属含有センサータンパク質の構造と機能」, 青野重利 (2007年–2009年).

科研費特定領域研究(公募研究), 「ガス分子により駆動される新規なセンサータンパク質の機能発現機構」, 青野重利 (2007年–2010年).

ノバルティス科学振興財団研究奨励金, 「ガス分子により駆動される生体内シグナル伝達の分子機構解明」, 青野重利 (2010年).

野田産業科学研究所研究助成, 「ヘムをシグナル分子とする *Lactococcus lactis* における遺伝子発現制御」, 青野重利 (2011年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「環境汚染物質検出用の高感度蛍光プローブを装備したホーミングセルの創製」, 青野重利 (2011年–2012年).

科研費基盤研究(B), 「ガス分子による生体機能制御に関与するセンサータンパク質の構造と機能」, 青野重利 (2011年–2013年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「生物の環境センシング機能を基盤とした高感度な環境汚染物質検出システムの構築」, 青野重利 (2013年–2014年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「環境汚染物質に対する自発集積能を有する高感度汚染検出システムの構築」, 青野重利 (2015年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

生物は、様々な外部環境の変化に応答・対応しながら、生体内の恒常性を維持している。我々の研究グループでは、生物にとって最も重要な遷移金属イオンである鉄イオンの細胞内恒常性維持に興味をもち、細胞内の鉄イオンの恒常性維持機構解明を目的とした研究に取り組んでいる。なかでも、鉄イオンを含む化合物であるヘム分子に着目し、細胞内ヘム濃度の恒常性維持に関与している転写調節因子やヘム分子取込み・排出に関与する一連のタンパク質の構造機能相関解明に関する研究に重点を置き、研究を進めている。本研究は、細胞中における遷移金属イオン濃度の恒常性維持機構の解明という、大きな研究目標への出発点ともいえる研究である。今後は、構造生物学的、ならびに生化学・分子生物学的な実験手法を活用し、ヘムを含む遷移金属イオンの細胞内濃度恒常性維持に関与するタンパク質群の構造機能相関解明を進めて行きたいと考えている。

加 藤 晃 一（教授）（2008 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：構造生物学，タンパク質科学，糖鎖生物学，NMR 分光学

A-2) 研究課題：

- a) NMR 分光法をはじめとする物理化学的手法による複合糖質およびタンパク質の構造・ダイナミクス・相互作用の解析
- b) 生化学・分子生物学・超分子化学的アプローチによるタンパク質の構造機能解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 私たちは、細胞内で新たに生み出されたタンパク質の運命が、それらが担う糖鎖の構造によって決定されていることを明らかにしてきた。そして、その分子メカニズムを立体構造解析を通じて探求している。小胞体において新生糖タンパク質が立体構造を整えるプロセスにおいては、糖鎖の非還元末端に限られた時間だけ存在しているグルコース残基が分子シャペロンによって認識される目印として機能しており、これによって糖タンパク質の折り畳みが介助されている。私たちが2016年に立体構造を解き明かしたグルコシダーゼ II は、この目印を露出させて分子シャペロンが認識可能な状態にするとともに、一定時間が経過した後にこれを取り除くという2段階の反応を司る酵素である。X線結晶構造解析によって明らかにした本酵素の立体構造により、触媒サブユニットが2段階の反応を不連続的に触媒するのに適した瓢箪型の基質結合ポケットを備えていること、そしてそれが糖鎖認識ドメインを含む調節サブユニットと会合する仕組みの詳細を理解することができた。一方、分子動力学計算と NMR 解析によって、分子シャペロンが認識する糖鎖の動的3次元構造を明らかにした。具体的には、非還元末端グルコース残基を含む12糖からなる3分岐糖鎖について、レプリカ交換分子動力学計算によってコンフォメーション空間を探索するとともに、酵母遺伝子破壊、化学合成、試験管内酵素反応を駆使して本糖鎖の完全 ^{13}C 標識体を作成し、還元末端に導入したランタニドイオンがもたらす常磁性効果を観測して原子の空間配置に関する情報を得た。こうした実験データによって裏付けられた分子シミュレーションにより、多様な構造を形成する糖鎖が分子シャペロンとの相互作用を通じて新たな立体構造を形成する誘導適合に基づく分子認識の仕組みを理解することができた。また、常磁性効果を利用した NMR 解析をタンパク質のコンフォメーション変化の観測に応用することにも成功した。具体的には、部位特異的にスピラベルを施したヒト免疫不全ウイルス逆転写酵素を用いて、阻害剤の結合に伴うコンフォメーション変化を常磁性緩和促進効果を通じて検出することができた（カセサート大・Supa Hannongbua 博士らとの共同研究）。この方法は、標的タンパク質にアロステリック効果を誘起する化合物を探索するための新たなアプローチを示すものである。
- b) 国内外の共同研究を通じて生命分子の構造機能に関するいくつかの新知見を得た。代表的な成果として、ジストログライカノパチーの原因遺伝子産物の遺伝子破壊細胞を利用した質量分析により α -ジストログリカンのラミニン結合性糖鎖におけるポストリン酸修飾の構造を明らかにした（台湾中央研究院・Kay-Hooi Khoo 博士らとの共同研究）。また、重水素標識を利用した中性子散乱実験を非変性質量分析と組み合わせることにより、ヒト水晶体の分子シャペロンである αB -クリスタリンの会合体の4次構造ダイナミクスおよびシアノバクテリアの時計タンパク質複合体形成の協同性とサブユニット空間配置に関する情報を得ることができた（京都大学・杉山正明博士，統合バイオ・内山 進博士らとの共同研究）。

B-1) 学術論文

- M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and K. NISHIMURA**, “Membrane-Induced Dichotomous Conformation of Amyloid β with the Disordered N-Terminal Segment Followed by the Stable C-Terminal β Structure,” *PLoS One* **11**, e0146405 (2016).
- S. SEETAHA, M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, K. ISHII, S. HANNONGBUA, K. CHOOWONGKOMON and K. KATO**, “Application of Site-Specific Spin Labeling for NMR Detecting Inhibitor-Induced Conformational Change of HIV-1 Reverse Transcriptase,” *ChemMedChem* **11**, 363–366 (2016).
- T. SATOH, T. TOSHIMORI, G. W. YAN, T. YAMAGUCHI and K. KATO**, “Structural Basis for Two-Step Glucose Trimming by Glucosidase II Involved in ER Glycoprotein Quality Control,” *Sci. Rep.* **6**, 20575 (2016).
- J. HABCHI, P. AROSIO, M. PERNI, A. R. COSTA, M. YAGI-UTSUMI, P. JOSHI, S. CHIA, S. I. COHEN, M. B. MULLER, S. LINSE, E. A. NOLLEN, C. M. DOBSON, T. P. KNOWLES and M. VENDRUSCOLO**, “An Anticancer Drug Suppresses the Primary Nucleation Reaction That Initiates the Production of the Toxic A β 42 Aggregates Linked with Alzheimer’s Disease,” *Sci. Adv.* **2**, e1501244 (2016).
- R. THAMMAPORN, K. ISHII, M. YAGI-UTSUMI, S. UCHIYAMA, S. HANNONGBUA and K. KATO**, “Mass Spectrometric Characterization of HIV-1 Reverse Transcriptase Interactions with Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors,” *Biol. Pharm. Bull.* **39**, 450–454 (2016).
- R. INOUE, T. TAKATA, N. FUJII, K. ISHII, S. UCHIYAMA, N. SATO, Y. OBA, K. WOOD, K. KATO, N. FUJII and M. SUGIYAMA**, “New Insight into the Dynamical System of α B-Crystallin Oligomers,” *Sci. Rep.* **6**, 29208 (2016).
- H. ITO, H. KAJI, A. TOGAYACHI, P. AZADI, M. ISHIHARA, R. GEYER, C. GALUSKA, H. GEYER, K. KAKEHI, M. KINOSHITA, N. G. KARLSSON, C. S. JIN, K. KATO, H. YAGI, S. KONDO, N. KAWASAKI, N. HASHII, D. KOLARICH, K. STAVENHAGEN, N. H. PACKER, M. THAYSEN-ANDERSEN, M. NAKANO, N. TANIGUCHI, A. KURIMOTO, Y. WADA, M. TAJIRI, P. Y. YANG, W. Q. CAO, H. LI, P. M. RUDD and H. NARIMATSU**, “Comparison of Analytical Methods for Profiling *N*- and *O*-Linked Glycans from Cultured Cell Lines: HUPO Human Disease Glycomics/Proteome Initiative Multi-Institutional Study,” *Glycoconjugate J.* **33**, 405–415 (2016).
- M. SUGIYAMA, H. YAGI, K. ISHII, L. PORCAR, A. MARTEL, K. OYAMA, M. NODA, Y. YUNOKI, R. MURAKAMI, R. INOUE, N. SATO, Y. OBA, K. TERAUCHI, S. UCHIYAMA and K. KATO**, “Structural Characterization of the Circadian Clock Protein Complex Composed of KaiB and KaiC by Inverse Contrast-Matching Small-Angle Neutron Scattering,” *Sci. Rep.* **6**, 35567 (2016).
- T. SATOH, T. TOSHIMORI, M. NODA, S. UCHIYAMA and K. KATO**, “Interaction Mode between Catalytic and Regulatory Subunits in Glucosidase II Involved in ER Glycoprotein Quality Control,” *Protein Sci.* **25**, 2095–2101 (2016).
- H. YAGI, C. W. KUO, T. OBAYASHI, S. NINAGAWA, K. H. KHOO and K. KATO**, “Direct Mapping of Additional Modifications on Phosphorylated O-Glycans of α -Dystroglycan by Mass Spectrometry Analysis in Conjunction with Knocking out of Causative Genes for Dystroglycanopathy,” *Mol. Cell Proteomics* **15**, 3424–3434 (2016).

B-3) 総説、著書

- M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, R. KITAHARA and K. KATO**, “NMR Explorations of Biomolecular Systems with Rapid Conformational Exchanges,” in *Molecular Science of Fluctuations Toward Biological Functions*, M. Terazima, M. Kataoka, R. Ueoka and Y. Okamoto, Eds., 87–103 (2016).

A. FURUKAWA, T. KONUMA, S. YANAKA and K. SUGASE, “Quantitative Analysis of Protein-Ligand Interactions by NMR,” *Prog. Nucl. Mag. Reson. Spectrosc.* **96**, 47–57 (2016).

加藤晃一, 谷中冴子, 矢木-内海真穂, 「NMR 構造生物学がもたらす新たな創薬研究のツール」, *MEDCHEM NEWS* **26**, 195–200 (2016).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

S. YANAKA, “The Analysis of Structural Dynamics Using NMR for the Understanding of the Protein Functions and for Designing Drugs,” The 12th SOKENDAI Life Science Retreat, Kakegawa (Japan), January 2016.

加藤晃一, 「糖鎖の構造生物学」, 第57回構造生物応用研究会, 東京, 2016年2月.

T. SATOH, T. ZHU, T. TOSHIMORI, K. SUZUKI, G. I YAN, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Structural Insights into N-Glycan-Mediated Fate-Determination of Glycoproteins in Cells,” Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON) 2016, Bangkok (Thailand), February 2016.

S. YANAKA, K. TSUMOTO and K. SUGASE, “Affinity Improvement of Antibody through Mutational Modification of the Conformational Dynamics,” 8th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), February 2016.

谷中冴子, 「溶液NMRを用いた蛋白質試料の測定と解析」, 2015年度NMR 集合研修, 岡崎, 2016年2月.

K. KATO, “Structural Views of Functional Glycans of Pharmaceutical Interest,” 6th International Symposium on “Current Trends in Drug Discovery & Research,” Lucknow (India), February 2016.*

K. KATO and S. YANAKA, “Structural Study of Glycoproteins Using Antibodies as Model Systems,” KIAS Seminar, Seoul (Korea), March 2016.

加藤晃一, 「糖鎖の生命分子構造学」, 第371回CBI学会講演会, 大阪, 2016年4月.

K. KATO, “Structural Views of Glycoprotein Quality Control in Cells,” 2nd KU-IMS Symposium, Bangkok (Thailand), June 2016.

加藤晃一, 「生生命分子の動的秩序形成におけるマイクロ-マクロ相関の探索と設計原理の探求」, 平成28年度全体班会議, 長浜, 2016年6月.

加藤晃一, 「多彩な糖鎖の構造・ダイナミクス・相互作用の分子科学」, 第43回生体分子科学討論会, 名古屋, 2016年6月.

加藤晃一, 「糖鎖の生命分子構造学の探索・創生・展開」, 生体機能関連化学部会若手の会第28回サマースクール, 蒲郡, 2016年7月.

K. KATO, “Platform for Integrative Biological Sciences,” 28th International Carbohydrate Symposium, New Orleans (U.S.A.), July 2016.

K. KATO, “Structural Views of Glycan-Dependent Determination of Glycoprotein Fates in Cells,” 28th International Carbohydrate Symposium, New Orleans (U.S.A.), July 2016.*

矢木真穂, 「タンパク質の構造ダイナミクスと分子集合メカニズムの理解を目指して」, 分子研若手の会, 岡崎, 2016年7月.

加藤晃一, 「バイオ医薬品の構造解析: 基礎と応用」, 技術情報協会セミナー, 東京, 2016年8月.

K. KATO, “Dynamic Ordering of Biomolecular and Artificial Systems,” OIIB Summer School 2016, Okazaki (Japan), August 2016.

M. YAGI-UTSUMI and K. KATO, “Interactions of Amyloidogenic Proteins with Membranes and Molecular Chaperones,” The 17th International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems, Kyoto (Japan), August 2016.

K. KATO, “Structural Views of Glycofunctions of Biological and Pharmaceutical Interest,” The 5th International Symposium on Drug Discovery and Design by NMR, Yokohama (Japan), August 2016.

K. KATO, T. YAMAGUCHI and T. SATOH, “Structural Basis of Glycoprotein-Fate Determination in Cell,” The 16th KIAS Conference on Protein Structure and Function, Seoul (Korea), September 2016.

K. KATO, “Carbohydrate Dynamics That Determine Protein Fates and Functions,” IGER International Symposium on Science of Molecular Assembly and Biomolecular Systems 2016, Nagoya (Japan), September 2016.

K. KATO, “Structural Basis for Dynamic Orchestration of Proteasomes,” The 42nd Naito Conference, Sapporo (Japan), October 2016.

K. KATO, “Structural Insights into Proteasome Orchestration Mechanisms,” The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.

M. YAGI-UTSUMI, T. SATOH and K. KATO, “Structural Basis for Interactions of Molecular Chaperones with Intrinsically Disordered Proteins,” The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.

S. YANAKA, R. YOGO, H. YAGI and K. KATO, “Characterization of Antibody Interactions in Serum Environments,” The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.
加藤晃一, 「生命分子システムの秩序形成のダイナミクス」, 次世代脳プロジェクト冬のシンポジウム, 東京, 2016年12月.

B-6) 受賞, 表彰

加藤晃一, 日本薬学会奨励賞 (2000).

神谷由紀子, 特定領域研究「タンパク質の社会」全体班会議ポスター優秀賞 (2008).

西尾美穂, 第73回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2009).

神谷由紀子, 糖鎖科学名古屋拠点若手研究者奨励賞 (2009).

矢木真穂, 第74回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2010).

西尾美穂, 糖鎖科学名古屋拠点第8回「若手の力フォーラム」奨励賞 (2010).

加藤晃一, 日本薬学会学術振興賞 (2011).

矢木真穂, 第11回蛋白質科学会年会若手奨励賞 (2011).

山本さよこ, The International Symposium on Nuclear Magnetic Resonance 2011 (ISNMR 2011) 若手ポスター賞 (2011).

加藤晃一, 第48回ベルツ賞1等賞 (2011).

山口拓実, 日本化学会第92春季年会優秀講演賞(学術) (2012).

Y. ZHANG, 平成24年度総合研究大学院大学学長賞 (2012).

雲井健太郎, 第12回日本蛋白質科学会年会ポスター賞 (2012).

山口拓実, 第15回日本糖質学会ポスター賞 (2013).

Y. ZHANG, 糖鎖科学中部拠点奨励賞 (2013).

山口拓実, 第7回バイオ関連化学シンポジウム講演賞 (2013).

山口拓実, 第3回自然科学研究機構若手研究者賞 (2014).

T. ZHU, 第87回日本生化学会大会若手優秀発表者賞(鈴木紘一メモリアル賞) (2014).

矢木真穂, The 3rd International Symposium of “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions” Poster Presentation Award (2015).

A. SIKDAR, The Winter School of Sokendai/ Asian CORE Program, Poster Presentation Award (2015).
T. ZHU, 第12回「若手の力」フォーラム平成27年度糖鎖科学中部拠点奨励賞 (2015).
T. ZHU, The 4th International Symposium of “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions”
 Poster Presentation Award (2015).
 谷中冴子, 第32回井上研究奨励賞 (2016).
 谷中冴子, 第80回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2016).
 與語理那, OIIB retreat 2016 Best Poster Award (2016).
 柚木康弘, 第4回将来を見据えた生体分子の構造・機能解析から分子設計に関する研究会優秀発表賞 (2016).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメーシング学会評議員 (1995–), 理事 (2012–2016).
 日本生化学会評議員 (2002–), 代議員 (2005–).
 日本糖質学会評議員 (2003–), 理事 (2013–).
 日本核磁気共鳴学会評議員 (2006–2012, 2016–), 理事 (2008–2012, 2014–), 副会長 (2016–).
 NPO バイオものづくり中部理事 (2008–2016).
 日本蛋白質科学会理事 (2010–2014, 2015–), 副会長 (2016–).
 日本糖鎖科学コンソーシアム幹事 (2012–), 常任幹事 (2016–).
 日本生物物理学会委員 (2013), 代議員 (2014–2015).
 日本生化学会中部支部幹事 (2014–), 副支部長 (2016–).

学会の組織委員等

The 71st Okazaki Conference “New perspectives on molecular science of glycoconjugates” 組織委員 (2011).
 第51回NMR 討論会運営委員 (2012).
 第27回生体系磁気共鳴国際会議 (ICMRBS) 実行委員 (2013–2016).
 第13回糖鎖科学コンソーシアムシンポジウム世話人代表 (2015).
 第25回バイオイメーシング学会組織委員・大会長 (2016).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2009–).
 日本学術振興会先端科学シンポジウム事業委員会 プランニング・グループ・メンバー (2009–2011).
 生物系特定産業技術研究支援センターイノベーション創出基礎的研究推進事業書類審査専門委員 (2009–).
 大阪大学蛋白質研究所専門委員会委員 (2014–), 同委員長 (2015).
 大阪大学蛋白質研究所「共同利用・共同研究」委員会超高磁場NMR 共同利用・共同研究専門部会委員 (2012–).
 独立行政法人科学技術振興機構戦略研究推進部外部評価委員 (2012–2014).
 経済産業省 第3者委員会委員 (2013).
 文部科学省研究振興局 委員会評価者 (2013–).
 独立行政法人大学評価・学位授与機構教育研究評価委員会専門委員 (2015–).
 理化学研究所NMR 施設NMR 利用研究ワーキンググループ委員 (2016–).

学会誌編集委員

Open Glycoscience, Editorial board member (2008–).

Glycoconjugate Journal, Editorial board member (2009–).

World Journal of Biological Chemistry, Editorial board member (2010–).

Journal of Glycomics & Lipidomics, Editorial board member (2010–2015).

Glycobiology, Editorial board member (2011–).

The Journal of Biochemistry, Associate Editor (2014–).

Scientific Reports, Editorial board member (2015–).

競争的資金等の領域長等

新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」領域代表者 (2013–).

その他

(株) グライエンス科学技術顧問 (2004–2014), 取締役 (2005–2013).

(株) 医学生物学研究所科学技術顧問 (2014–2016).

総合研究大学院大学統合生命科学特別委員会委員長 (2013–2015).

出前授業「身近な化学反応で学ぼう! タンパク質のかたちとはたらき」, 矢作北中学校 (2016). (矢木真穂)

B-8) 大学での講義, 客員

名古屋市立大学薬学部, 大学院薬学研究科, 特任教授, 2008年4月–.

名古屋市立大学薬学部, 「構造生物学」「薬学物理化学II」「生命薬科学研究入門」「薬学概論」「テーマ科目 創薬と生命」「免疫学」「バイオインフォマティクス」「創薬科学・知的財産活用論」, 2016年.

名古屋市立大学大学院薬学研究科, 「創薬生命科学基礎II」「生命分子構造学特論」, 2016年.

理化学研究所, 客員研究員, 2009年4月–.

国立長寿医療研究センター認知症先進医療開発センター, 客員研究員, 2011年4月–.

名古屋大学大学院理学研究科, 非常勤講師, グリーン自然科学国際教育研究プログラム(博士課程リーディングプログラム自然科学連携講義)「構造生物学特論I・II」, 2016年.

B-10) 競争的資金

特定非営利活動法人バイオものづくり中部, 「糖鎖分科会」, 加藤晃一 (2005年–2006年).

科研費特定領域研究「グライコミクス」, 「NMRを利用した構造グライコミクス」, 加藤晃一 (2005年–2006年).

科研費萌芽研究, 「味覚修飾タンパク質クルクリンの機能発現メカニズムの解明と応用」, 加藤晃一 (2005年–2006年).

ノバルティス研究奨励金, 「NMR 構造生物学によるパーキンソン病発症メカニズムの解明」, 加藤晃一 (2006年).

科研費基盤研究(B), 「タンパク質分解における糖鎖修飾系とユビキチン修飾系のクロストークの構造的基盤」, 加藤晃一 (2006年–2007年).

科研費新学術領域研究「揺らぎが機能を定める生命分子の科学」(計画研究), 「NMRを利用したタンパク質および複合糖質の揺らぎの検出とその機能関連の探査」, 加藤晃一 (2008年–2013年).

科研費基盤研究(B), 「ポスト小胞体品質管理における細胞内レクチンの分子認識と超分子形成の構造基盤の解明」, 加藤晃一 (2009年–).

科研費研究活動スタート支援,「アミロイド線維末端の特異構造の解明に基づく線維伸長メカニズムの理解」, 矢木真穂 (2011年–2013年).

科研費挑戦的萌芽研究,「分子シャペロン機能を有するシャトル型プロテアソーム活性化因子の同定と構造機能解析」, 加藤晃一 (2012年–2014年).

科研費基盤研究(A),「糖鎖認識系を標的とする創薬を目指した複合糖質機能の構造基盤の解明と分子設計」, 加藤晃一 (2012年–2015年).

科研費新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」(総括班),「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現の研究に関する総括」, 加藤晃一 (2013年–).

科研費新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」(計画研究),「生命分子の動的秩序形成におけるマイクロ-マクロ相関の探索と設計原理の探求」, 加藤晃一 (2013年–).

科研費挑戦的萌芽研究,「機能性ネオ糖脂質クラスターを利用した神経幹細胞の幹細胞性制御」, 加藤晃一 (2014年–).

科研費若手研究(B),「ガングリオシド糖脂質クラスター上におけるアミロイド β の構造転換の精密解析」, 矢木真穂 (2015年–).

科研費基盤研究(A),「多元的構造生物学アプローチによるプロテアソーム形成機構の解明と創薬への展開」, 加藤晃一 (2015年–).

科研費新学術領域研究,「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現の研究推進のための国際活動支援」, 加藤晃一 (2015年–).

宇宙航空研究開発機構「さほう」利用フィジビリティスタディ,「神経変性疾患の発症機構解明に向けた微小重力環境下でのアミロイド線維形成と性状評価」, 加藤晃一 (2016年–).

B-11) 産学連携

協和発酵キリン(株)抗体研究所,「ヒトIgG1とヒトFc γ 受容体IIIaとの結合状態の構造解析」, 加藤晃一 (2016年).

味の素(株)ライフサイエンス研究所,「味覚変調蛋白質の立体構造形成と機能発現に関する研究」, 加藤晃一 (2016年).

太陽日酸(株),「タンパク質の安定同位体標識技術の開発」, 加藤晃一 (2016年).

C) 研究活動の課題と展望

2017年は、新学術領域「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」および岡崎統合バイオサイエンスセンターのオリオンプロジェクトのさらなる躍進を目指すとともに、新たな生命科学研究の方向性を模索する年となるであろう。研究プロジェクトとしては、前年までの成果を踏まえて、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す。そのために、生命分子システムの動的秩序形成におけるマイクロ-マクロ相関の探索を可能とする物理化学的計測手法の開発と応用に一層力を注ぐ。さらに、超分子化学と生命分子科学の融合研究と国際共同研究の発展を推進する。

飯 野 亮 太（教授）（2014 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：生物物理学，分子機械，分子モーター，1 分子計測，構造解析

A-2) 研究課題：

- a) リニア分子モーターセルラーゼ，キチナーゼのエネルギー変換機構の解明
- b) 回転分子モーター V-ATPase のエネルギー変換機構の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) エキソ型セルラーゼやキチナーゼは結晶性多糖を加水分解しながら連続的に直進運動するリニア分子モーターである。しかしながら，キネシンやミオシン等の ATP 駆動のリニア分子モーターとは運動機構が全く異なる。我々はセルラーゼ，キチナーゼの作動機構の解明を目指し，1 分子計測，構造解析，非天然分子創造という複合アプローチで研究を行っている。カビ *Trichoderma reesei* 由来の *TrCel6A* は加水分解を行う触媒ドメイン（CD）と結合ドメイン（CBM）が糖鎖修飾されたリンカー領域で繋がった構造をしている。しかしそれぞれのドメインが分解反応においてどのような役割を担っているのか，詳細に解析した例はなかった。また，*TrCel6A* はセルロース上を直進運動しながら分解反応を行うと考えられていたが，実際に運動を観測した例はなかった。蛍光 1 分子観察により結合，運動，解離の反応時定数を解析した結果，リンカー領域でセルロースに結合し，結合ドメインで結合する結晶面の選択性を生み出している事が明らかとなった。また不活性型酵素と天然型酵素の運動を比較した結果，*TrCel6A* は 8.8 nm/sec の速度で直進運動し，一回の結合あたり 68 回加水分解反応を行っている事が明らかとなった。加えてドメイン構成の異なる細菌 *Cellulomonas fimi* 由来セルラーゼ *CfCel6B* と *TrCel6A* の結晶性セルロース分解反応の素過程（結合・分解・解離）の速度定数を全て明らかにすることにも成功し，構造と動態の相関解析に成功した。その結果を基に，各ドメインを交換したキメラ酵素の創成に取り組んでいる。キチナーゼについては金ナノ粒子の修飾方法の改良と酵素への結合箇所の検討により 1.2 nm 間隔のステップ運動を検出する事に成功した。計測の精度をさらに上げる為，顕微鏡の改良を行っている。
- b) 腸内連鎖球菌由来 Na^+ 輸送性 V-ATPase (EhV_0V_1) は，ATP 加水分解反応のエネルギーで回転運動して Na^+ イオンを能動輸送する分子モーターであり，親水性部 EhV_1 を単離すると ATP を分解しながら回転する。 EhV_1 の化学力学共役機構を明らかにするため，ATP 加水分解反応に重要なアミノ酸残基アルギニンフィンガーに変異を導入し詳細な 1 分子解析を行った。その結果，反応生成物 ADP の解離に相当する素過程の同定に初めて成功した。

B-1) 学術論文

M. BABA, K. IWAMOTO, R. IINO, H. UENO, M. HARA, A. NAKANISHIA, J. KISHIKAWA, H. NOJI and K. YOKOYAMA, “Rotation of Artificial Rotor Axles in Rotary Molecular Motors,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **113**, 11214–11219 (2016).

A. NAKAMURA, T. TASAKI, D. ISHIWATA, M. YAMAMOTO, Y. OKUNI, A. VISOOTSAT, M. MAXIMILIEN, H. NOJI, T. UCHIYAMA, M. SAMEJIMA, K. IGARASHI and R. IINO, “Single-Molecule Imaging Analysis of Binding, Processive Movement, and Dissociation of Cellobiohydrolase *Trichoderma reesei* Cel6A and Its Domains on Crystalline Cellulose,” *J. Biol. Chem.* **291**, 22404–22413 (2016).

H. ISOJIMA, R. IINO, Y. NIITANI, H. NOJI and M. TOMISHIGE, “Direct Observation of Intermediate States During the Stepping Motion Of Kinesin-1,” *Nat. Chem. Biol.* **12**, 290–297 (2016).

Y. MATSUMOTO, S. SAKAKIHARA, A. GRUSHNIKOV, K. KIKUCHI, H. NOJI, A. YAMAGUCHI, R. IINO, Y. YAGI and K. NISHINO, “A Microfluidic Channel Method for Rapid Drug-Susceptibility Testing of *Pseudomonas aeruginosa*,” *PLoS One* **11**, e0148797 (2016).

M. TACHIOKA, N. SUGIMOTO, A. NAKAMURA, N. SUNAGAWA, T. ISHIDA, T. UCHIYAMA, K. IGARASHI and M. SAMEJIMA, “Development of Simple Random Mutagenesis Protocol for the Protein Expression System in *Pichia pastoris*,” *Biotechnol. Biofuels* **9**, 199 (10 pages) (2016).

B-3) 総説, 著書

R. IINO, S. SAKAKIHARA, Y. MATSUMOTO and K. NISHINO, “Single-cell detection and collection of persister bacteria in a directly accessible femtoliter droplet array,” *Methods. Mol. Biol.* **1333**, 101–109 (2016).

A. NAKAMURA, T. ISHIDA, M. SAMEJIMA and K. IGARASHI, “The use of neutron scattering to determine the functional structure of glycoside hydrolase,” *Curr. Opin. Struct. Biol.* **40**, 54–61 (2016).

中村彰彦, 石田卓也, 日下勝弘, 田中伊知朗, 新村信雄, 鮫島正浩, 五十嵐圭日子, 「中性子／X線複合構造解析で酵素触媒反応におけるプロトンリレーを可視化する」, *生物物理* **56(3)**, 171–173 (2016).

中村彰彦, 石田卓也, 鮫島正浩, 五十嵐圭日子, 「中性子構造解析で明らかになった立体反転型セルラーゼのユニークな活性残基」, *バイオサイエンスとインダストリー* **74(3)**, 231–233 (2016).

中村彰彦, 石田卓也, 日下勝弘, 田中伊知朗, 新村信雄, 鮫島正浩, 五十嵐圭日子, 「中性子／X線結晶構造解析によって明らかとなった反転型セルロース加水分解酵素のプロトン伝達経路を含んだ反応機構」, *中性子科学会「波紋」* **26(3)**, 139–142, (2016).

B-4) 招待講演

R. IINO, “Watching dynamic motions of biological molecular machines,” 7th RIES-Hokudai International Symposium, Sapporo (Japan), December 2016.

R. IINO, “Intermediate states during the stepping motion of kinesin-1 revealed by high-speed single-molecule imaging with gold nanoprobe,” 4th Kanazawa Bio-AFM Workshop, Kanazawa (Japan), October 2016.

R. IINO, “Direct observation of intermediate states during the stepping motion of kinesin-1,” Biophysical Society Thematic Meeting: Engineering Approaches to Biomolecular Motors: From in vitro to in vivo, Vancouver (Canada), June 2016.

R. IINO, “Biomass decomposition by cellulase observed at the single-molecule level,” The symposium at Faculty of Science, Kasetsart University, Bangkok (Thailand), June 2016.

R. IINO, “Direct observation of intermediate states during the stepping motion of kinesin-1,” 8th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), February 2016.

R. IINO, “Single-molecule analysis of new molecular motors hydrolyzing crystalline polysaccharides,” PACCON2016, Bangkok (Thailand), February 2016.

飯野亮太, 「金ナノプローブを用いた生体分子モーターの高速・高精度1分子計測」, 生理研研究会「電子顕微鏡ビッグデータが拓くバイオメディカルサイエンス～限界を超えるための顕微鏡技術～」, 岡崎, 2016年11月.

飯野亮太,「マイクロ・ナノデバイスを用いた1分子・1細胞ナノバイオ計測」, MNC2016技術セミナー「マイクロ・ナノバイオ技術の最前線」, 京都, 2016年 11月.

飯野亮太,「金ナノプローブで生体分子の速いダイナミクスを観る」, 第25回バイオイメーキング学会学術集会シンポジウム「ナノバイオイメーキング: 1分子から細胞までの先端手法」, 名古屋, 2016年 9月.

飯野亮太,「タンパク質分子機械を観る, 操る, 壊す, 創る」, 日本化学会生体機能関連化学部会若手の会第28回サマースクール, 蒲郡, 2016年 7月.

飯野亮太, “Our approaches toward ‘real’ engineering of protein molecular machines,” 分子研研究会「超機能分子の創成: 合成, 計測, 数理が織りなす社会実装分子の戦略的設計と開発」, 岡崎, 2016年 6月.

飯野亮太,「機動分子科学: 趣旨説明」, 日本化学会第96春季年会特別企画シンポジウム「機能を動きで実現する機動分子の科学」, 京田辺, 2016年 3月.

飯野亮太,「金ナノプローブでタンパク質分子モーターのダイナミクスを観る」, 新学術領域研究「柔らかな分子系」第15回ワークショップ『ダイナミクス観測からタンパク質の「柔らかさ」を観る』, 大阪, 2016年 3月.

A. NAKAMURA, “Analysis of functional structure of cellulase by neutron crystallography,” 8th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Sciences, Okazaki (Japan), February 2016.

B-6) 受賞, 表彰

R. IINO, Emerging Investigator. Lab on a Chip., The Royal Society of Chemistry, U.K. (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会代議員 (2014–2016).

日本生物物理学会分野別専門委員 (A-13. モータータンパク質) (2014).

日本生物物理学会分野別専門委員 (E-04. タンパク質工学) (2016).

学会誌編集委員

日本生物物理学会学会誌「生物物理」編集委員 (2014–2015).

Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, Associate Editor (2015.4.29–).

その他

公益財団法人新世代研究所バイオ単分子研究会委員 (2012.4.2–2018.3).

日本生物物理学会小中高校への講師派遣サポート事業講師 (2016.11–).

B-8) 大学での講義, 客員

名古屋大学IGER, 非常勤講師,「自然科学連携講義1」, 2016年 11月.

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構新分野創成センターイメーキングサイエンス研究分野プロジェクト,「金ナノプローブ表面の電場増強を利用した生体分子モーターの動きと化学反応の複合1分子計測法の開発」, 飯野亮太 (2016年).

科研費新学術領域研究「動的秩序と機能」(公募研究),「糖質加水分解サイボグリニア分子モーターの創生」, 飯野亮太 (2016年–2017年).

科研費新学術領域研究「柔らかな分子系」(公募研究),「金属ナノプローブを用いた分子モーターの運動と構造変化の高速1分子計測」,飯野亮太(2016年–2017年).

自然科学研究機構新分野創成センターイメージングサイエンス研究分野プロジェクト,「金ナノロッドの高速高精度光学イメージングによる生体分子モーターの複合1分子計測」,飯野亮太(2015年).

科研費基盤研究(B),「ナトリウムイオン輸送性 V-ATPase のエネルギー変換機構の解明」,飯野亮太(2015年–2017年).

大幸財団自然科学研究助成,「回虫精子アメーバ運動の完全再構成にむけたプロテオーム解析」,飯野亮太(2015年–2016年).

科研費研究活動スタート支援,「セルロース分解酵素のモーター運動に寄与する構造要素の解明」,中村彰彦(2015年–2016年).

科研費新学術領域研究「動的秩序と機能」(公募研究),「ATP 駆動サイボグ回転分子モーターの創生」,飯野亮太(2014年–2015年).

科研費新学術領域研究「柔らかな分子系」(公募研究),「金ナノロッドを用いた分子モーター構造ダイナミクスの高速1分子計測」,飯野亮太(2014年–2015年).

科研費特別研究員奨励費,「ダブルドメインセルラーゼの吸着バランス制御による結晶性多糖構造分解反応の促進」,中村彰彦(2013年–2014年).

科研費基盤研究(B),「リニアモータータンパク質糖質加水分解酵素の1ナノメートルステップの1分子計測」,飯野亮太(2012年–2014年).

科研費挑戦的萌芽研究,「生体・人工ハイブリッドナノモーターの創製」,飯野亮太(2012年–2013年).

科研費新学術領域研究「揺らぎと生体機能」(公募研究),「分子モーターの構造揺らぎを調べる超高速配向イメージング法の開発」,飯野亮太(2011年–2012年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究),「生細胞内1分子FRET 法による回転モータータンパク質のダイナミクス計測」,飯野亮太(2010年–2011年).

科研費新学術領域研究「揺らぎと生体機能」(公募研究),「モータータンパク質の揺らぎと性能の相関を調べる超高速光学顕微鏡の開発」,飯野亮太(2009年–2010年).

科研費若手研究(B),「プロトン駆動力で回転するATP 合成酵素を1分子技術とマイクロデバイスで可視化する」,飯野亮太(2009年–2010年).

科研費若手研究(B),「プロトン駆動力で回転する生体分子モーター ATP 合成酵素の1分子計測」,飯野亮太(2006年–2008年).

日本学術振興会二国間交流事業共同研究,「生細胞内で働くATP 合成酵素の回転速度を1分子技術で計測する」,飯野亮太(2010年–2011年).

大阪大学産業科学研究所リーダーシップ支援経費,「1細菌培養・観察・回収用マイクロドロップレットアレイの開発」,飯野亮太(2009年).

C) 研究活動の課題と展望

リニア分子モーターセルラーゼ, キチナーゼについては, 運動素過程(ポーズとステップ)の可視化が重要な課題である。高時間・高空間分解能1分子計測によりキチナーゼの1 nm ステップを可視化する事ができたが, 更なる解析の為に, 顕微鏡の改良を行うだけでなく観測データの解析方法の改良も試みる。また, ドメイン交換した非天然セルラーゼを創造し, 天然型の性能を凌駕する分子を創り出す。回転分子モーター V-ATPase に関しては, ATP 加水分解駆動時の化学力学共役の完全な理解, およびNa⁺ 輸送を伴う回転運動の詳細な解析が今後の課題である。さらに, ATP 結合部位(触媒サイト)やイオン結合部位を改造し, 天然に存在しない新しい機能を持つ回転分子モーターを創り出す。

栗原 顕 輔 (特任准教授(岡崎オリオンプロジェクト)) (2014 年 5 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：界面化学，超分子化学

A-2) 研究課題：

- a) 増殖に最適な組成選択を行うベシクル系の構築
- b) ペプチド合成系を内包するベシクルの創成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子集合体に異種の膜分子前駆体を添加し，別の分子集合体を誕生させて，その増殖ダイナミクスを見守る。自己触媒反応系を内部に持ち，増殖するオクチルアニリンの油滴に，アルデヒドを持つ膜分子前駆体を添加すると，自己生産するベシクルへと形態変化する系を構築した。この成果を論文として報告した。このようなベシクルの多様性は，生命起源が自己複製する脂質膜から誕生したとするリピッドワールド仮説を拡張するものである。
- b) 有機化学を基礎とした細胞モデルに代謝機能，すなわち酵素を構成するタンパク質をベシクル内部で形成し，しかも増殖が可能な人工細胞はいまだ構築されていない。そこで，本研究は，ベシクル外部に存在しているアミノ酸を輸送体が捕捉することで，ベシクルの内部へと輸送し，ペプチドを化学合成する人工リボソームシステムを内包する細胞モデルの構築を目的とする。またアミノ酸を取り込んでペプチドを合成する油滴と，境界膜に化学変換できる油滴の2つの油滴システムを利用し，内部で高分子を合成するベシクル型人工細胞を構築する。

B-1) 学術論文

L. SHENG and K. KURIHARA, “Catalytic Amphiphile Generation in a Self-Reproducing Giant Vesicle,” *Chem. Lett.* **45**, 598–600 (2016).

L. SHENG and K. KURIHARA, “Transformation of Oil Droplets into Giant Vesicles,” *Chem. Commun.* **52**, 7786–7789 (2016).

B-4) 招待講演

K. KURIHARA, “A chemical approach to primitive cell,” The 6th Yonsei-IMS Joint Workshop, Seoul (Korea), March 2016.
栗原顕輔, 「外部環境に応答する原始細胞モデルの構築」, ABC ミニワークショップ「極限環境の光合成」, 立川, 2016年2月.

K. KURIHARA, “A study of the primitive cell as an assembly plant of the prebiotic materials,” The 4th Astrobiology Workshop, Tokyo (Japan), March 2016.

栗原顕輔, 「柔らかい分子集合体で創る人工細胞」, 第一回オルガネラ生理学研究会, 岡崎, 2016年7月.

栗原顕輔, 「化学で創る人工細胞」, 細胞を創る研究会 9.0, 東京, 2016年11月.

B-7) 学会および社会的活動

その他

あいち科学技術教育推進協議会発表会「科学三昧 in あいち 2014」英語発表指導 (2014).

愛知教育大学付属岡崎中学校取材 (2015).

第6回CSJ 化学フェスタ2016ポスター審査 (2016).

朝日新聞「先端人」取材 (2016).

国際芸術祭「虹のキャラヴァンサライ・あいちトリエンナーレ2016」(2016).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学,「統合生命科学教育プログラム」, 2016年 10月-11月.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(B),「交差触媒系を内包するベシクル型人工細胞の構築」, 栗原顕輔 (2015年-2017年).

自然科学研究機構新分野創成センター宇宙における生命研究分野プロジェクト,「生命材料物質の組み立て場としてみた原始細胞膜の基礎的研究」, 栗原顕輔 (2016年).

クリタ水・環境化学振興財団研究助成,「原始海洋に誕生した細胞モデルの研究」, 栗原顕輔 (2016年).

中部科学技術センター学術奨励研究助成,「ドラッグデリバリーシステムを指向したオリゴペプチド内包リポソームの開発」, 栗原顕輔 (2016年).

花王芸術・科学財団化学・物理学分野助成,「化学的リポソームシステムを内包するジャイアントベシクルの創成」, 栗原顕輔 (2016年).

C) 研究活動の課題と展望

本研究では, 構成的アプローチの考え方から, 既知の分子で「生命らしい」機能や挙動を示す物質を創成することを目的としている。この目標を達成するために, 現在の細胞と同じ物性をもつ両親媒性分子で, 人工細胞モデルを構築することが両課題で共通となっている。課題aでは油状のオクチルアニリンを用いて別相にすることで可逆反応を偏らせて, 自己生産する油滴系を構築し, それを足場にベシクルの大量生産に成功した。また課題bではこれまでの「うつわ」ありきの手法ではなく, 不定形な状態から代謝に必要なたんぱく質モデルを合成したのちに, 「うつわ」を形成するという斬新な概念を提案した。特別な機能を持たない物質から構築される人工細胞が, どのように「生命らしい」挙動を獲得するのかを, 本アプローチで解決したい。

生体分子情報研究部門

古 谷 祐 詞（准教授）（2009 年 3 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：生物物理学, 生体分子科学

A-2) 研究課題：

- a) 哺乳動物カリウムイオンチャネルのイオン選択性制御メカニズムの解析
- b) 耐熱性ロドプシン TR が起こす光反応の分子機構, およびその特異性の解明
- c) ウシ由来オプシンへの匂い物質結合の赤外分光解析
- d) 高圧力下での時間分解赤外分光計測系の構築とバクテリオロドプシンへの適用
- e) 急速溶液交換法を用いたイオンチャネル, トランスポーターの分子機構解析
- f) 無脊椎動物の脳内光受容機能を担うタンパク質の解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 細胞が機能するためには, カリウムイオンを選択的に透過するイオンチャネル（カリウムチャネル）が重要である。TWIK-1 というカリウムチャネルは細胞の静止膜電位の調整にはたっているが, 細胞外環境に応じてナトリウムイオンの透過性が上昇するという特異な性質を有する。TWIK-1 タンパク質を精製し, 脂質小胞に再構成した試料に対して, 蛍光インジケータを用いてイオンの透過機能を解析し, このチャネルタンパク質単体がナトリウムイオンを透過する特性を持つことを確認した。さらに機能解析に用いたタンパク質と脂質の組み合わせで再構成試料を作製し, より生理的な状態でのイオン交換に伴う赤外吸収変化の解析に成功した。
- b) Thermophilic Rhodopsin (TR) は最近になって発見された初めての好熱菌由来のロドプシンでありその熱安定性の分子機構に興味を持たれている。昨年度は TR の野生型試料と変異体試料を用いて, 光反応の大枠とその温度依存性について明らかにした。今年度は TR の発色団近傍にあるアスパラギン酸残基 229 番を変異させた試料の測定も加え, 発色団からのプロトン移動にこの残基が不可欠であることを明らかにした。また, TR と分子系統的に近縁だが熱耐性を持たない Gloeobacter Rhodopsin (GR) と比較し, 両者の光反応過程における構造変化の違いを浮き彫りにした。本研究は岡山大学薬学部の須藤雄気教授, 塚本卓助教との共同研究として進めている。
- c) 視覚ロドプシンは G タンパク質共役受容体 (GPCR) と呼ばれる巨大な膜タンパク質ファミリーの 1 種であるため, 同じく GPCR に属する嗅覚を司る受容体と共通した分子機構が存在する。昨年度より, 発色団を排除したロドプシン（オプシン）への匂い物質の結合を全反射赤外分光法 (ATR) で調べている。昨年度の段階で匂い物質結合に伴うカルボン酸やタンパク質骨格由来の吸収変化の信号を得ることができていたが, SN 比の悪い結果に留まっていた。今年度はさらに実験回数を増やし SN 比を向上した。変異体を用いた計測から, 匂い物質とオプシンとの結合様式について推定した。本研究はカナダのトロント大学医学部の Oliver P. Ernst 教授, 森住威文研究員との共同研究として進めている。
- d) 時間分解フーリエ変換赤外分光 (TR-FTIR) 法はタンパク質反応の解析に有用な手法であるが, これが物理化学的に重要な圧力摂動の下で適用されたことはほとんどない。そこで, 光反応タンパク質の高圧下 TR-FTIR 測定が可能な系の構築を開始した。まず高圧セル（ダイヤモンドアンビルセル）を購入し, さらに赤外分光器内でのセル位置の精密な制御と温度管理が可能な高圧セルホルダーを分子研装置開発室の協力のもと製作した。この測定系を, バク

テリオロドプシンに適用し、高圧力下での時間分解赤外差スペクトルを得ることに成功した。

- e) これまでに全反射赤外計測用の結晶上に吸着させたイオンチャネルやトランスポーターなどの膜タンパク質が浸された緩衝液を急速に交換することで時間分解赤外分光計測を行う実験系を構築した。本手法をメリビオース輸送タンパク質に適用し、メリビオースやグルコースが含まれる緩衝液に急速交換することで、時間分解赤外スペクトルを得た。本研究は、スペインのバレンシア大学の Victor Lorenz-Fonfria 博士との共同研究として進めている。
- f) 多くの動物は、視覚以外にも概日時計の調節などの用途に光情報を用いている。最近の研究から、Opn3 という光受容タンパク質が無脊椎動物の脳内光受容に関わることが示されている。そこで、種々の無脊椎動物の Opn3 の吸収波長特性を調べた結果、紫外領域から緑色光領域まで、動物種によって大きく異なることを見出した。また、環形動物ゴカイの Opn3 については、紫外光受容をもたらしアミノ酸残基を特定し、細胞内に紫外光シグナルを伝達するメカニズムを明らかにした。

B-1) 学術論文

M. SRISA-ART and Y. FURUTANI, “Simple and Rapid Fabrication of PDMS Microfluidic Devices Compatible with FTIR Microspectroscopy,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **89**, 196–202 (2016).

A. SAKAMOTO, T. TSUKAMOTO, Y. FURUTANI, Y. SUDO, K. SHIMADA, A. TOMITA, H. KIIYOI, T. KATO and T. FUNATSU, “Live-Cell Single-Molecule Imaging of the Cytokine Receptor MPL for Analysis of Dynamic Dimerization,” *J. Mol. Cell Biol.* **8**, 553–555 (2016).

K. KUROI, F. SATO, Y. NAKASONE, K. ZIKIHARA, S. TOKUTOMI and M. TERAZIMA, “Time-Resolved Fluctuation during the Photochemical Reaction of a Photoreceptor Protein: Phototropin1LOV2-Linker,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 6228–6238 (2016).

T. NAKAJIMA, K. KUROI, Y. NAKASONE, K. OKAJIMA, M. IKEUCHI, S. TOKUTOMI and M. TERAZIMA, “Anomalous Pressure Effects on the Photoreaction of a Light-Sensor Protein from *Synechocystis*, PixD (Slr1694), and the Compressibility Change of Its Intermediates,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 25915–25925 (2016).

B-3) 総説、著書

古谷祐詞, 「光誘起赤外差分分光法による微生物型ロドプシンのイオン輸送機構の研究」, 日本レーザー医学会誌 **36(4)**, 460–465 (2016).

古谷祐詞, 「菌類のロドプシン」, 「光と生命の事典」, 朝倉書店, 154–155 (2016).

塚本寿夫, 「無脊椎動物オプシン」, 「光と生命の事典」, 朝倉書店, 176–177 (2016).

B-4) 招待講演

Y. FURUTANI, “Molecular Mechanisms of Retinal Proteins with Involvement of Water Molecules Studied by Light-Induced Difference Infrared Spectroscopy,” 26th IUPAC International Symposium on Photochemistry, Osaka City Central Public Hall, Osaka (Japan), April 2016.

古谷祐詞, 「赤外分光計測によるカリウムチャネルのイオン選択機構の研究」, 第1回イオンチャネル研究会～チャネルどんたく～, 福岡大学病院, 福岡, 2016年7月.

古谷祐詞,「オプトジェネティクスで活躍する微生物型ロドプシンの分子機構研究」, 生化学若い研究者の会第56回生命科学夏の学校, 旅館かつら, 宮城県白石市, 2016年8月.

Y. FURUTANI and H. TSUKAMOTO, “Amide I vibrations could be fingerprints of ion–protein interactions of potassium ion channels with alkali metal cations,” The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Commodore Hotel, Gyeongju (Korea), November 2016.

塚本寿夫,「無脊椎動物における繊毛型オプシンの分子特性と非視覚の光受容」, 第19回日本光生物学協会年会, 東京大学, 東京, 2016年7月.

B-6) 受賞, 表彰

古谷祐詞, 平成19年度名古屋工業大学職員褒賞優秀賞 (2007).

古谷祐詞, 平成24年度分子科学研究奨励森野基金 (2012).

古谷祐詞, 第6回(2013年度)分子科学会奨励賞 (2013).

古谷祐詞, 木村哲就, 岡本基士, 第1回BIOPHYSICS Editor's Choice Award (2014).

古谷祐詞, 清水啓史, 浅井祐介, 老木成稔, 神取秀樹, 第3回Biophysics and Physicobiology Editor's Choice Award (2016).

塚本寿夫, 平成24年度日本生物物理学会中部支部講演会優秀発表者 (2013).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会委員 (2010–2011, 2012–2013), 理事 (2015–2016).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2010–2013, 2015–2016).

日本物理学会領域12運営委員 生物物理 (2011–2012).

日本化学会東海支部代議員 (2011–2012, 2013–2014).

分子科学会顕彰委員会委員 (2014–2016).

日本分光学会中部支部幹事 (2012–2016).

学会の組織委員等

第15回レチナルタンパク質国際会議実行委員 (2012–2014), 座長 (2014).

学会誌編集委員

日本生物物理学会中部地区編集委員 (2007, 2010).

B-8) 大学での講義, 客員

名古屋大学大学院理学研究科,「生体物理学特別講義2」, 2016年9月21, 23日.

大阪大学大学院工学研究科,「CSC 集中講義」, 2016年12月8日–9日.

B-10) 競争的資金

科研費若手研究(スタートアップ),「ATR-FTIR 分光法によるロドプシンのタンパク質間相互作用の解析」, 古谷祐詞 (2006年).

科研費特定領域研究「革新的ナノバイオ」(公募研究),「光駆動プロトンポンプの動作機構の解明」, 古谷祐詞 (2007年–2008年).

科研費特定領域研究「細胞感覚」(公募研究),「古細菌型ロドプシンの新奇情報伝達機構の解明」, 古谷祐詞 (2007年–2008年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究),「孤立ナノ空間に形成された水クラスターの水素結合ダイナミクス解析」, 古谷祐詞 (2008年–2009年).

科研費特定領域研究「革新的ナノバイオ」(公募研究),「光駆動イオン輸送蛋白質の動作機構の解明」, 古谷祐詞 (2009年–2010年).

科研費特定領域研究「細胞感覚」(公募研究),「古細菌型ロドプシンの新奇情報伝達機構の解明と光応答性カリウムチャネルの開発」, 古谷祐詞 (2009年–2010年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究),「孤立ナノ空間を有する有機金属錯体での特異な光化学反応の分光解析」, 古谷祐詞 (2010年–2011年).

科研費若手研究(B),「赤外差スペクトル法によるイオン輸送蛋白質の分子機構解明」, 古谷祐詞 (2010年–2011年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「膜輸送蛋白質によるイオン選択・透過・輸送の分子科学」, 古谷祐詞 (2010年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「イオンチャネル蛋白質のイオン認識および開閉制御の分子機構解明」, 古谷祐詞 (2011年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「様々な光エネルギー変換系における水分子の構造・機能相関解明」, 古谷祐詞 (2011年–2014年).

科研費挑戦的萌芽研究,「哺乳動物イオンチャネルの機能的発現と分子機構解析」, 古谷祐詞 (2012年–2013年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「イオンチャネル蛋白質の物理・化学刺激によるゲート開閉の分子機構解明」, 古谷祐詞 (2013年).

科研費挑戦的萌芽研究,「膜電位存在下での膜タンパク質の赤外分光解析系の開発」, 古谷祐詞 (2014年–2016年).

科研費若手研究(A),「膜タンパク質の分子機構解明に資する新規赤外分光計測法の開発」, 古谷祐詞 (2014年–2017年).

総合研究大学院大学学融合推進センター公募型研究事業事業枠II「学融合共同研究」,「動物が「見えない光」を受容するメカニズム——化学と生理学を融合したアプローチ——」, 古谷祐詞 (2015年–2016年).

ノバルティス科学振興財団研究奨励金,「部位特異的蛍光標識を用いたGタンパク質共役受容体の動的構造変化の解析」, 塚本寿夫 (2012年).

科研費若手研究(B),「哺乳動物が環境光を感知するためのメラノプシンの分子特性の解明」, 塚本寿夫 (2013年–2014年).

上原記念生命科学財団研究奨励金,「メラノプシンを用いたカルシウムシグナリングの光制御」, 塚本寿夫 (2015年).

科研費研究活動スタート支援,「温度圧力条件下の赤外分光法による耐熱性ロドプシンの光反応機構の解明」, 黒井邦巧 (2015年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

これまで赤外分光法を基軸に様々な膜タンパク質の分子機構研究に取り組んできた。光受容タンパク質ロドプシンだけでなく、分子研着任後に開始したイオンチャネルやトランスポーターなど光が関与しない膜タンパク質についての研究が着実に進展している。ほ乳動物由来のカリウムチャネルは、生理研の久保教授との共同研究として、助教の塚本博士が中心になって進めている。チャネル活性が確認できる試料および実験条件を確立することに成功したので、来年度には成果として取りまとめることができるものと期待している。IMS フェローの黒井博士は、高温条件や高圧条件などでの時間分解赤外分光計測を行うなど、膜タンパク質としては極限条件下での計測に成功している。今後も赤外分光法を基軸とした研究を発展させたいが、新規計測系の構築や新たな膜タンパク質の計測などを試みることで、新たな研究の方向性を模索したい。

錯体触媒研究部門

魚 住 泰 広（教授）（2000 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機合成化学，有機金属化学

A-2) 研究課題：

- a) 不均一反応メディア中での触媒反応システムの構築
- b) 自己集積型金属錯体触媒の設計・開発
- c) 新しい遷移金属錯体触媒・ナノ構造触媒の創製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) パラジウム，ロジウム，銅錯体触媒などを両親媒性高分子に固定化するとともに機能修飾することで，これら遷移金属錯体触媒有機変換工程の多くを完全水系メディア中で実施することに成功した。水中不均一での高立体選択的触媒反応の開発を世界にさがけて成功した。
- b) 金属架橋高分子の自己集積触媒（架橋構造と触媒機能のハイブリッド）を開発し，さらにマイクロ流路内の層流界面での自己集積錯体触媒膜の創製に成功した。前項で開発した高分子触媒をカラムカートリッジ化することで実用性に富む連続フロー反応システムを構築した。
- c) 新しいピンサー錯体の合成方法論を確立し，それらピンサー錯体分子が自発的に集積することで形成する分子集合体の三次元高次構造に立脚した新しい触媒機能システムの開拓に注力しつつある。
- d) 水中での反応加速，連続フローシステムに依る効率化，ピンサー錯体触媒化学における新しい反応形式などに立脚して各種反応の ppm-ppb 触媒化を進めつつある。

B-1) 学術論文

Y. M. A. YAMADA, A. OHNO, T. SATO and Y. UOZUMI, “Instantaneous Click Chemistry by a Copper-Containing Polymeric Membrane-Installed Microflow Catalytic Reactor,” *Chem. –Eur. J.* **21**, 17269–17273 (2015).

G. SHEN, H. ZHOU, P. DU, S. LIU, K. ZOU and Y. UOZUMI, “Brønsted Acid-Catalyzed Selective C–C Bond Cleavage of 1,3-Diketones: A Facile Synthesis of 4(3H)-Quinazolinones in Aqueous Ethyl Lactate,” *RSC Adv.* **5**, 85646–85651 (2015).

Y. -H. KIN, J. HAN, B. Y. JUNG, H. BAEK, Y. M. A. YAMADA, Y. UOZUMI and Y. -S. LEE, “Production of Valuable Esters from Oleic Acid with a Porous Polymeric Acid Catalysts without Water Removal,” *Synlett* **27**, 29–32 (2016).

J. -C. HIERO and Y. UOZUMI, “Cluster Preface: Heterogeneous Catalysis,” *Synlett* **27**, 1177–1178 (2016).

A. OHTAKA, T. KOTERA, A. SAKON, K. UEDA, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA and R. NOMURA, “Fluoride-Free Hiyama Coupling Reaction Catalyzed by Linear Polystyrene-Stabilized PdO Nanoparticles in Water: Specific Reactivity of PdO Nanoparticles over Pd Nanoparticles,” *Synlett* **27**, 1202–1206 (2016).

S. YAN, S. PAN, T. OSAKO and Y. UOZUMI, “Recyclable Polystyrene-Supported Copper Catalysts for the Aerobic Oxidative Homocoupling of Terminal Alkynes,” *Synlett* **27**, 1232–1236 (2016).

A. OHTAKA, M. KOZONO, K. TAKAHASHI, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA and R. NOMURA, “Linear Polystyrene-Stabilized Pt Nanoparticles Catalyzed Indole Synthesis in Water via Aerobic Alcohol Oxidation,” *Chem. Lett.* **45**, 758–760 (2016).

H. BAEK, M. MINAKAWA Y. M. A. YAMADA, J. W. HAN and Y. UOZUMI, “In-Water and Neat Batch and Continuous-Flow Direct Esterification and Transesterification by a Porous Polymeric Acid Catalyst,” *Sci. Rep.* **6**, 25925 (2016).

G. HAMASAKA and Y. UOZUMI, “The Development of a Vesicular Self-Assembled Amphiphilic Platinum NCN-Pincer Complex and Its Catalytic Application to Hydrosilylation of Alkenes in Water,” *Chem. Lett.* **45**, 1244–1246 (2016).

B-4) 招待講演

Y. UOZUMI, “Amphiphilic polymeric transition metal catalyzed for coupling reaction in water,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

Y. UOZUMI, “Molecular architecture-based administration of catalysis in water via self-assembly of an amphiphilic palladium pincer complex,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

T. OSAKO, “Development green-sustainable transition-metal catalyzed reaction systems,” 日本化学会第96回春季年会若い世代特別講演会, 京田辺(日本), 2016年3月.

Y. UOZUMI, “Molecular architecture-based administration of catalysis in water via self-assembly of amphiphilic palladium pincer complexes,” JST-NTU Joint Seminar on Sustainable Synthesis and Catalysis, Singapore, August 2016.

Y. UOZUMI, “Highly active self-assembled polymeric transition metal catalysts for coupling reactions,” The 51st Conference: Advances in Organic, Bioorganic and Pharmaceutical Chemistry “LIBLICE2016,” Lázně Bělohrad (Czech), November 2016.

B-6) 受賞, 表彰

魚住泰広, 有機合成化学協会研究企画賞 (1992).

魚住泰広, 日本薬学会奨励賞 (1997).

山田陽一, 日本薬学会奨励賞 (2005).

魚住泰広, 第6回グリーン・サステイナブル・ケミストリー賞, 文部科学大臣賞 (2007).

魚住泰広, 平成18年度日本化学会学術賞 (2007).

山田陽一, 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2008).

山田陽一, Thieme Chemistry Journal Award (2008).

魚住泰広, 井上学術賞 (2010).

浜坂 剛, 第1回「名古屋大学石田賞」(2012).

大迫隆男, 有機合成化学協会研究企画賞 (2013).

魚住泰広, 文部科学大臣表彰科学技術賞 (2014).

大迫隆男, 第4回自然科学研究機構若手研究者賞 (2015).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

地球環境産業技術研究機構(RITE)技術評価分科会委員会 (2002–2004).

コンビナトリアル・ケミストリー研究会代表幹事 (1998–2009).

有機合成化学協会支部幹事 (1998–).

学会の組織委員等

名古屋メダル実行委員 (2000–).

International Conference on Organic Synthesis 実行委員 (2002–2004).

IUPAC meeting “Polymer in Organic Chemistry 2006” 実行委員 (2004–2006).

OMCOS 14 組織委員 (2006–2007).

触媒学会創設50周年記念国際シンポジウム組織委員 (2007–2009).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会第 116 委員会委員 (1998–).

日本学術振興会科学研究費補助金第一次審査員 (2002–2006).

科学振興調整費審査委員 (2003–2004).

振興調整費「新機能材料開発に資する強磁場固体NMR」研究運営委員 (2004–2007).

学会誌編集委員

日本化学会速報誌編集委員 (2001–2002).

SYNLETT 誌アジア地区編集主幹 (2002–).

Tetrahedron Asymmetry 誌アドバイザーボード (2002–).

SYNFACTS 誌編集委員 (2005–).

ACS Combinatorial Science 誌エディトリアルアドバイザーボード (2010–).

The Chemical Record 編集委員 (2010–).

その他

科学技術振興機構CREST 研究「水中での精密分子変換を実現するナノ遷移金属触媒創製」 研究リーダー (2002–2007).

理化学研究所研究チームリーダー (2007–).

経済産業省グリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発プロジェクト 研究チームリーダー (2008–2012).

科学技術振興機構CREST 研究「反応媒体駆動原理の確立と革新的触媒プロセスの開発」 研究副リーダー (2011–2016).

科学技術振興機構ACCEL 研究「超活性固定化触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底効率化」 研究代表 (2014–2019).

B-8) 大学での講義, 客員

中国湖北省三峡大学, 楚天学者講座教授, 2014年 8月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A) (一般研究), 「水中で機能する高分子分散型複合金属ナノ触媒の創製」, 魚住泰広 (2003年–2007年).

科研費特定領域研究 (計画研究: 研究項目番号 A03), 「理想化学変換プロセスを実現する新しい水中機能性個体触媒の開発」, 魚住泰広 (2006年–2009年).

経済産業省・戦略的技術開発グリーンサステナブルケミカルプロセス基盤技術開発, 「高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発」, 魚住泰広 (2009年–2012年).

科学技術振興機構CREST 研究,「水中での精密分子変換を実現するナノ遷移金属触媒創造」, 魚住泰広 (2002年–2008年).
科研費若手研究(B),「水中分子変換を実現する高分子担持銅触媒の創製」, 大迫隆男 (2010年–2011年).
科学技術振興機構CREST 研究,「反応媒体駆動原理の確立と革新的触媒プロセスの開発」, 魚住泰広 (2011年–2016年).
科研費新学術領域研究(研究領域提案型),「触媒膜導入マイクロ流路反応デバイスの創製」, 魚住泰広 (2010年–2013年).
科研費挑戦的萌芽研究,「ユビキタス金属ナノ粒子の触媒機能開発」, 魚住泰広 (2014年–2015年).
科研費若手研究(B),「ポリマー担持ユビキタスメタル触媒による高環境調和型水中フロー酸素酸化工程の開発」, 大迫隆男 (2014年–2015年).
科学技術振興機構ACCEL 研究,「超活性固定化触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底効率化」, 魚住泰広 (2014年–2019年).
科研費新学術研究,「高活性高分子触媒の創製と連続フローシステム化」, 魚住泰広 (2016年–).
科研費基盤研究(C),「二酸化炭素を用いた有機分子変換の環境調和型高効率フロー反応化」, 大迫隆男 (2016年–).

C) 研究活動の課題と展望

2000年にゼロからのスタートを切った精密有機分子変換反応のaqueous-switching, heterogeneous-switching の試みも十分な成果と蓄積を得てきた。これまでに水中機能性固定化触媒に関するCREST 研究が2008年3月に終了, 続いてその成果を実践的に発展させる経済産業省(NEDO) プロジェクト(2008年9月–2012年2月)を展開した。一方, 環境調和型触媒反応開発からの発展的研究課題がCRETS 研究「元素戦略」に採択され(2011年10月開始)2016年度内まで継続展開中である。さらに2014年12月からACCEL 研究(5年間)に採択され「超活性固定化触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底効率化」研究を進めつつある。また, 自己集積錯体触媒研究は2007年以降, 理化学研究所フロンティア研究に指名され同研究所に場所を移して展開中である。現時点では競争的研究資金の獲得も順調であり, 大学院生ならびに博士研究員の確保も問題ない。魚住の本拠地である分子科学研究所に於いては, 次の研究の萌芽を見いだし育てる研究に注力しており, 幾つかの新機軸候補課題の中から大きな発展に繋がる新課題を見いだしたいと考えている。なかでも最近では未開拓元素群の触媒反応性の探索と確立, さらに分子の自己集積化に立脚した触媒機能の自発的獲得など目指した研究開発を推進しつつある。これまでの高活性触媒の設計概念と駆動原理を駆使し, 従来パーセント量の利用が常識であった化学変換触媒をppm-ppb 量のレベルへと転換すべく研究に取り組んでいる。これは触媒活性の 10^4 – 10^7 向上を意味し, 「改善」を凌駕する「飛躍」が要求される圧倒的な高活性化である。

檜 山 儀 恵 (准教授) (2014 年 6 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

- a) プロトンを触媒とする不斉骨格転位反応
- b) 水素結合を鍵とする不斉分子触媒の設計・開発
- c) ハロゲン結合供与体触媒の設計・開発と有機分子変換

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) トリフルオロ酢酸による 1,2,2-置換ブテニルアミンの 1,3-アルキル移動反応に成功した。特に、1位の炭素上が光学的に純粋なブテニルアミンを用いた場合に良好な不斉転写率でプレニルアミンが得られることを見出した。本成果は、不斉 1,3-アルキル移動反応に成功した世界初の例である。
- b) 異なる2つの酸性官能基を有するキラルプレンステッド酸触媒を設計・開発した。特に、ピリジノアゾエステルとジエン類とのヘテロ Diels–Alder 反応において、カルボン酸–リン酸を触媒として用いることにより、位置選択性、エナンチオ選択性、ジアステレオ選択性の完全制御を達成した。
- c) ペンタフルオロヨードベンゼンが、ピリジンとアリルシラトランとのアリル化反応の触媒として機能することを見出した。本成果は、ハロゲン結合供与体が有機分子変換の触媒として機能することを示唆する重要な知見である。

B-1) 学術論文

N. MOMIYAMA, H. TABUSE, H. NODA, M. YAMANAKA, T. FUJINAMI, K. YAMANISHI, A. IZUMISEKI, K. FUNAYAMA, F. EGAWA, S. OKADA, H. ADACHI and 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.* **138**, 11353–11359 (2016).

J. KIKUCHI, N. MOMIYAMA and M. TERADA, “Chiral Phosphoric Acid-Catalyzed Diastereo- and Enantioselective Mannich-Type Reaction between Enamides and Thiazolones,” *Org. Lett.* **18**, 2521–2523 (2016).

N. MOMIYAMA, H. OKAMOTO, J. KIKUCHI, T. KORENAGA and 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).

N. MOMIYAMA, K. FUNAYAMA, H. NODA, M. YAMANAKA, N. AKASAKA, S. ISHIDA, T. IWAMOTO and M. TERADA, “Synthetic Method for 2,2’-Disubstituted Fluorinated Binaphthyl Derivatives and Application as Chiral Source in Design of Chiral Mono-Phosphoric Acid Catalyst,” *ACS Catal.* **6**, 949–956 (2016).

B-4) 招待講演

檜山儀恵, 「キラル分子の建築家をめざして」, 豊秋奨学会平成28年度国際学生交流同窓会, ホテルキャッスルプラザ, 名古屋, 2016年11月.

N. MOMIYAMA, "Asymmetric Reaction Space Created by Hydrogen and Halogen Atom," The Winter School of Asian CORE Program, Beijing (China), February 2016.

榎山儀恵, 「ペルフルオロ有機物を活用する有機分子変換」, フルオラス科学研究会第9回シンポジウム, 名古屋大学ベンチャービジネスラボラトリー, 名古屋, 2016年10月.

榎山儀恵, 「水素原子・ハロゲン原子が創り出す不斉空間・不斉反応」, 有機合成のニュートレンド2016, 大阪科学技術センター, 大阪, 2016年2月.

B-6) 受賞, 表彰

榎山儀恵, 大学女性協会第17回守田科学研究奨励賞 (2015).

榎山儀恵, 有機合成化学協会セントラル硝子研究企画賞平成26年度 (2014).

榎山儀恵, Thieme Chemistry Journals Award (2008).

榎山儀恵, Damon Runyon Cancer Research Foundation Post Doctoral Research Fellowship (2005).

榎山儀恵, Abbott Laboratories Graduate Fellowship (2005).

榎山儀恵, The Elizabeth R. Norton Prize for Excellence in Research in Chemistry (2003).

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代議員 (2015, 2016).

学会の組織委員等

総研大アジア冬の学校主催 (2015, 2016).

その他

出前授業愛知県立岡崎北高等学校 (2016).

出前授業「中学生のためのサイエンスセミナー」岡崎市立翔南中学校 (2014).

B-8) 大学での講義, 客員

豊橋技術科学大学環境・生命工学大学院, 特別講義II, 博士前期1・2年, 2016年.

B-10) 競争的資金

2016年度学術・研究助成・住友電工グループ社会貢献基金, 「多点間水素結合相互作用を活用する高活性キラル分子性触媒の創製」, 榎山儀恵 (2016年-2017年).

2016年度基礎科学研究助成・住友財団, 「異種酸性官能基複合型キラル分子性触媒による触媒的不斉連続反応の開発」, 榎山儀恵 (2016年-2017年).

公益財団法人豊秋奨学会平成28年度研究助成, 「異なる酸性官能基の隣接位導入による超高活性キラル分子性触媒の開発」, 榎山儀恵 (2016年-2017年).

平成28年度(第26回)自然科学系学術研究助成・大幸財団, 「異種酸性官能基複合型キラル分子性触媒の創製と精密合成反応の開発」, 榎山儀恵 (2016年-2017年).

2015年度内藤記念科学奨励金・研究助成,「ペルフルオロビナフチル誘導体の分子修飾に基づくキラルハロゲン結合供与体触媒の設計・開発」, 榎山儀恵 (2016年–2017年).

第28回ノバルティス研究奨励金,「不斉1, 3-アルキル移動反応の開発を基軸とする医薬品候補化合物の合成」, 榎山儀恵 (2015年–2016年).

平成27年度徳山科学技術振興財団研究助成,「ハロゲン化ペルフルオロアールの創製と触媒機能創出」, 榎山儀恵 (2015年–2016年).

2015年度ヨウ素研究助成金,「キラルヨウ素結合供与体触媒の設計・開発を基盤とする不斉合成」, 榎山儀恵 (2015年–2016年).

科研費基盤研究(C),「有機分子アリル化剤の開発を基軸とする革新的不斉有機分子触媒反応の開拓」, 榎山儀恵 (2011年–2013年).

科研費若手研究(B),「ペルフルオロフェニル基の特性を利用した不斉有機酸触媒の開発とアリル化反応への応用」, 榎山儀恵 (2009年–2010年).

科研費特定領域研究「協奏機能触媒」,「 π -アリル・0価鉄複合体—キラルプレンステッド酸触媒による新規アリル化反応の開発」, 榎山儀恵 (2008年–2009年).

科研費若手研究(スタートアップ),「酵素模倣型キラル求核触媒の設計および不斉反応の探索」, 榎山儀恵 (2007年–2008年).

公益信託林女性自然科学者研究助成基金,「アゾール／グアニジン2成分系キラル求核触媒の設計開発および不斉反応の探索」, 榎山儀恵 (2007年–2008年).

住友財団基礎化学研究助成,「アザ-コープ転位を基盤とする触媒的不斉炭素-炭素結合形成反応の開発」, 榎山儀恵 (2007年).

東北大学理学研究科若手奨励研究基金,「アザ-コープ転位を基盤とする触媒的不斉アリル化反応の開発」, 榎山儀恵 (2007年).

分子系高次構造体化学国際教育研究拠点若手奨励費研究,「高次構造アルカロイドの合成を指向した鍵中間体ピロリジンの触媒的不斉合成反応の開発」, 榎山儀恵 (2007年).

C) 研究活動の課題と展望

地球上に生存する生命を特徴付ける性質のひとつがキラリティーである。ほとんど全ての生体系は、本来的にキラルでありエナンチオマー的に純粋である。このことは、物質のキラリティーが至るところで私たちの日常に浸透している所以である。私たちの社会に欠かすことのできない物質・材料にキラリティーを組み入れること、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もつ。

当グループでは、キラル分子を供給する方法論の開拓とその確立を目指し、不斉分子触媒の設計・合成と触媒的不斉合成反応の開発を進めている。これまでに、不斉空間の構築ならびに不斉反応において「金属-配位子錯結合」よりも弱い相互作用である「水素結合」や「ハロゲン結合」の潜在的有用性を明らかにしつつある。水素結合やハロゲン結合の「強さ」と「方向性」を利用する戦略を不斉分子触媒・不斉合成反応の開発において確立することを目標に、引き続き研究を遂行する。将来的には、機能性物質合成としてのキラル化学からキラル分子の振る舞いを明らかにするキラル分子科学への応用展開を目指したい。

錯体物性研究部門

正 岡 重 行（准教授）（2011 年 2 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：錯体化学

A-2) 研究課題：

- a) 多電子酸化還元反応を促進する金属錯体触媒の開発
- b) 金属錯体を対象とした光電気化学的挙動の評価
- c) 金属錯体の規則配列による反応場構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 鉄や銅などの安価な金属イオンを有する金属錯体を対象に、酸素発生触媒の開発に取り組んだ。その結果、多核構造と隣接基質活性化サイトを併せ持つ鉄錯体を利用することで、高活性な酸素発生触媒を創製できることを見出した。また、電気化学測定、分光化学測定および量子化学計算の結果から、多電子移動反応と結合生成反応がそれぞれ効率よく進行する反応機構が示唆された。
- b) 溶存する金属錯体分子が光吸収に伴って引き起こす電子移動過程を理解するため、光照射下で電気化学測定が可能な光電気化学測定システムを開発した。また、開発した測定システムを用いて、光化学的な CO_2 還元反応に対して活性を示す種々の金属錯体触媒を対象に光電気化学測定を行い、光照射が触媒反応に与える影響を電気化学的に観測した。
- c) 自己集合作用を利用した金属錯体の規則配列と反応場構築を試みた。具体的には、反応活性点と高い対称性 (D_{4h}) を併せ持つパドルフィール型二核錯体に、分子間アレーン-パーフルオロアレーン相互作用が可能な官能基を導入し、自己集合を促すことで、反応活性点が細孔内に配置された多孔性フレームワークの構築に成功した。また、これらの多孔性フレームワークの物質変換機能についても評価した。

B-1) 学術論文

M. OKAMURA, M. KONDO, R. KUGA, Y. KURASHIGE, T. YANAI, S. HAYAMI, V. K. K. PRANEETH, M. YOSHIDA, K. YONEDA, S. KAWATA and S. MASAOKA, “A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation,” *Nature* **530**, 465–468 (2016).

V. K. K. PRANEETH, M. KONDO, P.-M. WOI, M. OKAMURA and S. MASAOKA, “Electrocatalytic Water Oxidation by a Tetranuclear Copper Complex,” *ChemPlusChem* **81**, 1123–1128 (2016).

K. KITAMOTO, M. OGAWA, G. AJAYAKUMAR, S. MASAOKA, H.-B. KRAATZ and K. SAKAI, “Molecular Photo-Charge-Separators Enabling Single-Pigment-Driven Multi-Electron Transfer and Storage Leading to H_2 Evolution from Water,” *Inorg. Chem. Front.* **3**, 671–680 (2016).

B-3) 総説、著書

M. KONDO and S. MASAOKA, “Water Oxidation Catalysts Constructed by Bio-Relevant First-Row Metal Complexes,” *Chem. Lett.* **45**, 1220–1231 (2016).

B-4) 招待講演

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” 8th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference (AsBIC8), Auckland (New Zealand), December 2016.

S. MASAOKA, “A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation,” 5th International Symposium on Solar Fuels and Solar Cells (5th SFSC), Dalian (China), October 2016.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” Japan-Korea-Taiwan Bioinorganic Chemistry Symposium 2016, Okazaki (Japan), September 2016.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” Challenges for dream catalysis—Design of catalytically active centers from the concept of coordination, 66th JSCC conference, Fukuoka University, Fukuoka (Japan), September 2016.

S. MASAOKA, “A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation,” The 1st Japan-Australia Joint Symposium on Coordination Chemistry, Fukuoka University, Fukuoka (Japan), September 2016.

正岡重行, 「植物に学ぶ触媒デザイン: 水から酸素を作る鉄5核錯体」, 第4回バイオ関連化学シンポジウム若手フォーラム, 金沢駅東もてなしドーム地下イベント広場, 金沢, 2016年9月.

正岡重行, 「電子状態の柔軟性が生み出す触媒機能」, 第3回機能化学研究会「構造・電子状態の柔軟性が生み出す新機能」, 猿投温泉, 豊田, 2016年8月.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” 2nd UK-Japan Workshop on Solar Fuels and CO₂ Conversion: British Embassy Tokyo, Tokyo (Japan), June 2016.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” 12th International Workshop on Supramolecular Nanoscience of Chemically Programmed Pigments (SNCPPI6), Ritsumeikan University, Kusatsu (Japan), June 2016.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” The 21st iCeMS International Symposium “Emerging Science for Unlocking Cell’s Secrets,” iCeMS Main Building, Kyoto University, Kyoto (Japan), June 2016.

S. MASAOKA, “A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation,” The 2nd International Symposium on Chemical Energy Conversion Processes (ISCECP-2), Kyushu University, Fukuoka (Japan), May 2016.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」, 第9回中国四国地区錯体化学研究会(錯体化学若手の会中国四国支部第1回勉強会), 関西学院大学, 2016年5月.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする多電子酸化還元反応」, 第3回応用化学談話会, 東京大学, 東京, 2016年4月.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” Asian International Symposium—Coordination Chemistry, Organometallic Chemistry—, Doshisha University, Kyotanabe (Japan), March 2016.

正岡重行, 「低温度星まわりの生命居住可能惑星において起こり得る光合成反応の分子科学的考察」, 第4回宇宙と生命ワークショップ, 一橋大学一橋講堂, 東京, 2016年3月.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” The 4th Frontier Chemistry Center International Symposium “Future Dreams in Chemical Science and Technology: Bridges to Global Innovations,” Hokkaido University, Sapporo, February 2016.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする多電子酸化還元反応」, 第8回東北大学研究会プログラム「金属錯体の固体物性最前線——金属錯体と固体物性物理と生物物性の連携新領域を目指して——」, 東北大学, 仙台, 2016年2月.

正岡重行,「人工光合成を志向した金属錯体の化学」, ABC ミニワークショップ「極限環境の光合成」, 立川グランドホテル, 東京, 2016年 2月.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” Symposium on Hierarchy and Holism in Natural Sciences, National Astronomical Observatory of Japan, Mitaka, February 2016.

正岡重行,「鉄五核触媒の分子構造制御に基づく低過電圧酸素発生」, 新学術領域「人工光合成」第4回公開シンポジウム, 東京理科大学, 東京, 2016年 1月.

B-6) 受賞, 表彰

榎本孝文, Dalton Transactions Prize (2016).

榎本孝文, 錯体化学会第66回討論会ポスター賞 (2016).

榎本孝文, 日本化学会東海支部長賞 (2016).

S. K. LEE, The Winter School of Asian-Core Program, Poster Award (2016).

榎本孝文, 第27回配位化合物の光化学討論会ポスター賞 (2015).

榎本孝文, 2015年度総研大物理科学学生セミナー Adobe 賞 (2015).

榎本孝文, 伊豆 仁, 深津亜里紗, 2015年度総研大物理科学学生セミナー優秀発表賞 (2015).

深津亜里紗, International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2014), Excellent Poster Award (2014).

伊豆 仁, 第4回CSJ 化学フェスタ2014 優秀ポスター発表賞 (2014).

伊東貴宏, CrystEngComm Poster Prize (2014).

伊東貴宏, 錯体化学会第64回討論会ポスター賞 (2014).

岡村将也, 錯体化学会第63回討論会学生講演賞 (2013).

中村 豪, 平成25年度(第4回) 総合研究大学院大学学長賞 (2013).

吉田将己, 第2回CSJ 化学フェスタ2012 優秀ポスター賞 (2012).

中村 豪, 第2回CSJ 化学フェスタ2012 優秀ポスター賞 (2012).

岡村将也, 第2回CSJ 化学フェスタ2012 優秀ポスター賞 (2012).

村瀬雅和, 第2回CSJ 化学フェスタ2012 優秀ポスター賞 (2012).

近藤美欧, 第5回資生堂女性研究者サイエンスグラント (2012).

正岡重行, 若い世代の特別講演会講演賞 (2011).

正岡重行, 第53回錯体化学討論会ポスター賞 (2003).

正岡重行, 日本化学会第83回春季年会学生講演賞 (2003).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

錯体化学会副事務局長 (2015–).

錯体化学会理事 (2015–).

錯体化学会ホームページ委員 (2013–).

錯体化学会若手部会九州支部世話人 (2006–2010).

錯体化学会若手部会事務局 (2006).

学会の組織委員等

日本化学会第5回CSJ 化学フェスタ実行委員 (2015).

総研大アジア冬の学校2013主催 (2013).

錯体化学若手の会夏の学校2008主催 (2008).

分子情報科学若手セミナー主催 (2006).

学会誌編集委員

Scientific Reports, Nature Publishing Group, Editorial Board (2015–).

日本化学会「化学と工業」編集委員 (2013–).

B-8) 大学での講義, 客員

名城大学理工学部, 非常勤講師, 「錯体化学」, 2016年度後期.

名古屋大学大学院理学研究科, 客員准教授, 2013年4月–.

B-9) 学位授与

岡村将也, 「Development of New Transition Metal Complexes Designed for Water Oxidation」, 2016年3月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「クラスター錯体によるエネルギーキャリアのテーラーメイド合成」, 正岡重行 (2016年–2018年).

科研費研究活動スタート支援, 「多核錯体への柔軟なプロトン移動能の導入と水の酸化反応への影響」, 岡村将也 (2016年–2017年).

科研費新学術領域(公募研究), 「鉄五核触媒の分子構造制御に基づく低過電圧酸素発生」, 正岡重行 (2015年–2016年).

科研費若手研究(A), 「反応性超分子フレームワーク: 反応場の構築と反応の可視化」, 近藤美欧 (2015年–2018年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「光合成モジュールの人為的再構成によるサイボーグ植物の創出」, 正岡重行 (2015年).

自然科学研究機構新分野創成センター宇宙における生命研究分野プロジェクト, 「低温度星まわりの生命居住可能惑星において起こり得る光合成反応の分子科学的考察」, 正岡重行 (2015年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「異種金属多核錯体による革新的電気化学物質変換」, 正岡重行 (2014年–2016年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「酸素発生型光合成への挑戦: 機構理解と新機能創出」, 正岡重行 (2014年).

科研費若手研究(A), 「配位不飽和な自己集合性多核錯体を触媒とする多電子酸化還元反応」, 正岡重行 (2013年–2015年).

科研費新学術領域(公募研究), 「水の酸化の超高効率化を目指した超分子錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2013年–2014年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「酸素発生型光合成への挑戦: 機構理解と新機能創出」, 正岡重行 (2013年).

科学技術振興機構先導的物質変換領域, 「超分子クラスター触媒による水を電子源としたCO₂還元反応系の構築」, 近藤美欧 (2012年–2017年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「二次元反応場への金属錯体集積と水を基質とする革新的多電子物質変換」, 正岡重行 (2012年–2013年).

科研費若手研究(B),「高効率触媒界面の構築を目指した錯体プラットフォームの開発」, 近藤美欧 (2012年–2013年).

第5回資生堂女性研究者サイエンスグラント,「界面電子移動プログラミングによる水の完全光分解系の構築」, 近藤美欧 (2012年–2013年).

学融合推進センター公募研究事業事業枠③女性研究者支援,「界面電子移動反応を利用した水の完全光分解システムの創成」, 近藤美欧 (2012年).

科学技術振興機構さきがけ研究「光エネルギーと物質変換」領域,「水の可視光完全分解を可能にする高活性酸素発生触媒の創製」, 正岡重行 (2009年–2012年).

科研費若手研究(B),「水の分解反応に対する非貴金属系高活性金属錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2009年–2010年).

科学技術振興機構重点地域研究開発推進プログラム「シーズ発掘試験A (発掘型)」,「有機–無機複合型超高活性酸素発生錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2009年).

九州大学教育研究プログラム・研究拠点形成プロジェクト,「混合原子価2核錯体を用いた量子セルオートマトン材料の開発」, 正岡重行 (2009年).

(財)鉄鋼業環境保全技術開発基金第29回環境助成研究,「鉄–硫黄系金属錯体を用いた安価高活性水素発生触媒の創成」, 正岡重行 (2008年–2009年).

(財)日産科学振興財団環境研究助成,「水の完全光分解を実現可能とする高活性酸素発生触媒の創成」, 正岡重行 (2008年).

科研費若手研究(B),「高度に組織化された球状水素発生触媒の創製」, 正岡重行 (2006年–2007年).

B-11) 産学連携

ライオン(株)研究開発本部寄付金,「金属錯体系電子移動反応触媒研究の発展を奨励する研究費」, 正岡重行 (2016年).

C) 研究活動の課題と展望

我々の研究グループでは、太陽光エネルギーを貯蔵可能な化学エネルギーに変換できる次世代科学技術「人工光合成」の達成に向けて、金属錯体を対象とした基礎研究を進めている。2016年は、a) 多電子酸化還元反応を促進する金属錯体触媒の開発、b) 金属錯体を対象とした光電気化学的挙動の評価、c) 金属錯体の規則配列による反応場構築、を並行して推進し、それぞれ重要な研究成果を得ることができた。今後は、a) に関しては、水の四電子酸化反応に対する触媒機能の向上(反応速度上昇、過電圧低下等)に加え、多電子還元反応(CO_2 還元、 N_2 還元等)に対する触媒の開発にも取り組みたい。b) では、我々が開発した光電気化学測定システムをより多様な光電子移動系、光触媒反応系に展開したいと考えている。c) では、2016年までに構築した反応性フレームワークの触媒機能評価を行い、特異な反応場が触媒機能に与える影響を調査する。以上の研究を推進し、錯体型人工光合成システムの創出に向けた学術基盤を確立したい。

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，生物時計のリズム計測は長時間にわたるルーティンワークとなる。周期を高精度で見積もるためにはリズムを少なくとも 3 周期計測しなくてはならず，野生型の場合，72 時間（= 24 時間 × 3）にわたる作業が発生する。長周期型の変異体になると計測時間は更に長くなり，ときに 1～2 週間の連続測定を行うこともある。従事者の負担を軽減し，またヒューマンエラーを削減するため，リズム計測を自動化するためのオートサンプラー装置／解析ソフトウェアを開発して原著論文として発表した。
- 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

S. KANEMURA, M. OKUMURA, K. YUTANI, T. RAMMING, T. HIKIMA, C. APPENZELLER-HERZOG, S. AKIYAMA and K. INABA, “Human ER Oxidoreductin-1 α (Ero1 α) Undergoes Dual Regulation through Complementary Redox Interactions with Protein Disulfide Isomerase (PDI),” *J. Biol. Chem.* **291**, 23952–23964 (2016).

Y. FURUIKE, J. ABE, A. MUKAIYAMA and S. AKIYAMA, “Accelerating In Vitro Studies on Circadian Clock Systems Using an Automated Sampling Device,” *Biophys. Physicobiol.* **13**, 235–241 (2016).

I. ANZAI, K. TOICHI, E. TOKUDA, A. MUKAIYAMA, S. AKIYAMA and Y. FURUKAWA, “Screening of Drugs Inhibiting In Vitro Oligomerization of Cu/Zn-Superoxide Dismutase with a Mutation Causing Amyotrophic Lateral Sclerosis,” *Front. Mol. Biosci.* **3**, 40 (2016).

E. NANGO, S. AKIYAMA, S. MAKI-YONEKURA, Y. ASHIKAWA, Y. KUSAKABE, E. KRAYUKHINA, T. MARUNO, S. UCHIYAMA, N. NUEMKET, K. YONEKURA, M. SHIMIZU, N. ATSUMI, N. YASUI, T. HIKIMA, M. YAMAMOTO, Y. KOBAYASHI and A. YAMASHITA, “Taste Substance Binding Elicits Conformational Change of Taste Receptor T1r Heterodimer Extracellular Domains,” *Sci. Rep.* **6**, 25745 (2016).

Y. FURUKAWA, Y. SUZUKI, M. FUKUOKA, K. NAGASAWA, K. NAKAGOME, H. SHIMIZU, A. MUKAIYAMA and S. AKIYAMA, “A Molecular Mechanism Realizing Sequence-Specific Recognition of Nucleic Acids by TDP-43,” *Sci. Rep.* **6**, 20576 (2016).

Y. FURUKAWA, I. ANZAI, S. AKIYAMA, M. IMAI, F. J. C. CRUZ, T. SAIO, K. NAGASAWA, T. NOMURA and K. ISHIMORI, “Conformational Disorder of the Most Immature Cu,Zn-Superoxide Dismutase Leading to Amyotrophic Lateral Sclerosis,” *J. Biol. Chem.* **291**, 4144–4155 (2016).

B-3) 総説, 著書

J. ABE, A. MUKAIYAMA and S. AKIYAMA, “Absolute slowness encoded in the circadian clock protein KaiC,” *SPring-8/SACLA Research Frontiers* 2015, 24–25 (2016).

向山 厚, 阿部 淳, 孫 世永, 秋山修志, 「概日時計因子の構造や動態を調べる意義とは?」, *生物物理* **56**, 266–270 (2016).

秋山修志, 「時間生物学と放射光科学の接点」, *放射光* **29**, 56–63 (2016).

阿部 淳, 向山 厚, 秋山修志, 「時計タンパク質 KaiC の「遅さ」が刻み込まれた原子構造」, *SPring-8/SACLA 利用者情報* **21**, 2–4 (2016).

B-4) 招待講演

S. AKIYAMA, “Cyanobacterial circadian clock system. How and why can it be so slow and stable?” Sapporo Symposium on Biological Rhythm, Sapporo (Japan), November 2016.

S. AKIYAMA, “X-Ray Solution Scattering as Research Tools for Bio-molecular Systems,” The Winter School of Asian CORE Program, Beijing (China), February 2016.

A. MUKAIYAMA, J. ABE and S. AKIYAMA, “Circadian periodicity encoded in KaiC ATPase,” The Winter School of Asian CORE Program, Beijing (China), February 2016.

S. AKIYAMA, “Atomic-scale origins of slowness in the cyanobacterial circadian clock,” 8th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), February 2016.

秋山修志, 「生体分子システム研究に必要なツールとは?」, 中性子生命科学研究会「生命科学における中性子利用の現状と未来」, IQBRC 1階大会議室, 東海村, May 2016.

秋山修志, 「藍藻生物時計システムにおける分子動態と貫階層性」, 次ステージ機能生命科学の展望, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, March 2016.

秋山修志, 「階層横断的に機能する分子システムの構造アンサンブルとダイナミクス研究」, 第29回日本放射光学会年会, 東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト, 柏, January 2016.

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, 2016–).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2010, 2012, 2015, 2016).

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, 2016–).

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).

その他

出前授業「タンパク質の奏でる生体リズム」城北科学の日岡崎市立城北中学校 (2016).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さがけ研究, 「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

2015年にKaiCのATPaseドメインを原子分解能で構造解析し、2016年は生物時計システムのリズム計測を自動化するためのオートサンプラー装置／解析ソフトウェアを開発して原著論文として発表した。これによりグループ発足時に掲げた将来計画の一部が達成された。2017年からは当初の計画に沿って、温度補償制御の構造基盤の解明、変異体の大規模リズム解析、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) 計算機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、加えて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、更には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) α ヘリカルタンパク質構造のゼロからのデザイン；複数の α ヘリックスが集まった α ヘリカル構造は、極めて多様な構造を生み出すことができ、加えてそれらの構造は柔軟であるため、機能発現に重要な役割を果たす。そこで様々な α ヘリカル構造を自在にデザインするための手法の開発を行った。自然界のタンパク質構造を解析することで、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た。次に、これらのループパターンを組み合わせることで多様な形状の α ヘリカル構造の構築に成功した。さらに、計算機でデザインしたタンパク質の折り畳み能を生化学実験により調べたところ、デザインしたタンパク質は安定な構造を形成していた。
- b) 折り畳みに必須なアミノ酸の種類の探索；自然界のタンパク質は 20 種類のアミノ酸からなる。タンパク質が自発的に特定の構造に折り畳むために、これら 20 種類のアミノ酸全てが必要なかどうか明らかにすることを目的として、タンパク質の疎水性コアパッキングに重要とされる ILE および LEU を全く含まないタンパク質分子のデザインを行った。デザインしたタンパク質の折り畳み能を生化学実験により調べたところ、デザイン配列は安定な構造を形成していた。これらの研究結果は、タンパク質の折り畳みには 20 種類のアミノ酸が必ずしも必要ではないことを示唆するものである。
- c) ATP 結合タンパク質のゼロからのデザイン；自然界には ATP を加水分解して動的機能を発現するタンパク質が存在する。タンパク質が ATP を加水分解するためのミニマムな装置を明らかにすることを目的とし、まず ATP を結合するタンパク質のゼロからのデザインを行った。これまでに発見した 3 つのルールとヌクレオチド結合に重要とされる P-loop モチーフを用いることで、計算機上で ATP 結合タンパク質のデザインを行った。
- d) 自然界のタンパク質構造を改造して創るヘム結合タンパク質；ヘムを例としてこれに結合するタンパク質をデザインすることで、望みの小分子に結合するタンパク質分子をデザインする手法の開発を行った。自然界のタンパク質をベースとして、その構造に大きなポケットを持つように改造することで、計算機上でヘムを結合するタンパク質のデザインを行った。
- e) 動的機能を発現する自然界のタンパク質 F-ATPase および V-ATPase 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で機能を発現するタンパク質が存在する。このような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、進化の結果により生み出された自然界のタンパク質である F-ATPase および V-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

V. SWAMINATHAN, J. MATHEW KALAPPURAKKAL, S. B. MEHTA, P. NORDENFELT, T. I. MOORE, N. KOGA, D. BAKER, R. OLDENBOURG, T. TANI, S. MAYOR, T. A. SPRINGER and C. M. WATERMAN, “Actin Retrograde Flow Actively Aligns and Orients Ligand-Engaged Integrins In Focal Adhesions,” *bioRxiv* doi: <http://dx.doi.org/10.1101/071852> (2016).

P. NORDENFELT, T. I. MOORE, J. MATHEW KALAPPURAKKAL, V. SWAMINATHAN, N. KOGA, T. J. LAMBERT, D. BAKER, J. C. WATERS, R. OLDENBOURG, T. TANI, S. MAYOR, C. M. WATERMAN and T. A. SPRINGER, “Direction of Actin Flow Dictates Integrin LFA-I Orientation During Leukocyte Migration,” *bioRxiv* doi: <http://dx.doi.org/10.1101/071936> (2016).

B-4) 招待講演

古賀信康,「生体機動分子の合理デザインに向けて：ゼロからの創製と自然界の蛋白質の改造」, 同志社大学京田辺キャンパス, 京田辺市, 2016年3月.

古賀信康,「私が欲しいタンパク質分子模型」, 技術課セミナー「3D プリント造形技術の基礎と応用」, 分子科学研究所, 岡崎市, 2016年3月.

古賀信康,「タンパク質分子デザインと合成生物学への展開」, AMO 討論会, 理化学研究所, 和光市, 2016年6月.

古賀信康,「Design of various alpha-beta and myriad all-alpha protein structures」, 分子研研究会「超機能分子の創成：合成, 計測, 数値が織りなす社会実装分子の戦略的設計と開発」, 分子科学研究所, 岡崎市, 2016年6月.

古賀信康,「分子モーターの合理デザイン：ゼロからの創製と自然界のタンパク質の改造」, 分子モーター討論会, 大阪大学蛋白質研究所, 大阪市, 2016年7月.

古賀信康,「Synthetic approach for understanding molecular motors」, 統合バイオ・リトリート, 三河リゾートサンクス, 西尾市, 2016年11月.

古賀信康,「タンパク質分子の構造と機能のデザイン」, バイオスーパーコンピューティング研究会, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎市, 2016年11月.

古賀信康,「タンパク質分子の合理設計：構造と機能のデザイン」, 千葉大学第17回分子キラリティ研究センター定期ミーティング, 千葉大学, 千葉市, 2016年12月.

古賀信康,「タンパク質分子の合理設計」, 東京大学第4回応化談話会, 東京大学, 東京, 2016年12月.

T. KOSUGI, “De novo design of protein function,” 8th Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), February 2016.

小杉貴洋,「蛋白質機能を創って理解する」, 蛋白研セミナー「構造を基盤とする蛋白質科学における未解決問題」, 東京大学, 東京, 2016年3月.

T. KOSUGI, “Protein Design from Scratch: from Structure to Function,” 日本化学会第96春季年会アジア国際シンポジウム, 同志社大学京田辺キャンパス, 京田辺市, 2016年3月.

小杉貴洋,「機能を持った蛋白質を一から創る：蛋白質内化学反応の理解を目指して」, 研究会「化学反応のポテンシャル曲面とダイナミックス」, 京都大学, 京都市, 2016年3月.

小杉貴洋,「計算機による蛋白質設計：もう出来ることとまだ出来ないこと」, 第59回構造生物応用研究会, 東京大学, 東京, 2016年11月.

T. KOSUGI, “Design of Nucleotide Binding Site Toward Controlling and Understanding Molecular Motor,” 第54回日本生物物理学会年会 シンポジウム「構成的生物学による生体分子, 分子複合体, 分子ネットワークの理解」, つくば国際会議場, つくば市, 2016年11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).

日本生物物理学会平成28年度分野別専門委員: タンパク質設計・ドラッグデザイン (2016).

その他

第48回若手ペプチド夏の勉強会(大学セミナーハウス(八王子)) 講師 (2016.7.31-8.2).

第56回生物物理若手の会夏の学校(支笏湖ユースホステル(千歳市)) 講師 (2016.9.2-5).

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

今年度に入りグループの人数が4名増え全員で8名となった。前年度までに、計算機および生化学実験両方を用いてタンパク質をデザインするための研究環境の構築をほぼ終えていたため、今年度から加わったメンバーと新しい研究テーマをスムーズに実施することができた。また、今年度の目標であった、①ゼロからのタンパク質デザインと②自然界のタンパク質の改造の2本柱で研究を展開する体制を構築することができた。来年度はこれらの研究から、ぜひ成果を出したいと考えている。また、他研究室との共同研究についても立ち上げて行きたい。

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) マクロ量子振動基底状態
- c) 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) 超短パルスレーザーを用いて固体中での原子の運動および原子からの発光を観測し，そのダイナミクスを定量的に取り扱う理論を構築している。これまで知られていたレーザー発振メカニズムではないレーザー発振メカニズムを理論的に提示し，半定量的にはあるものの理論を支持出来る可能性のある実験結果を得た。また，原子のコヒーレントな運動はマクロ物理量で記述することが出来るため，過渡反射率を計測することでラマン過程の物理を詳細に調べる理論を構築し，実験で検証することが出来た。
- b) マクロな物質の振動基底状態はどのように実現されるのかという点に関しては冷却能力の物理的限界が色々と示されており，新しい冷却メカニズムを提示しなければ大きな質量を持つマクロな物体の振動基底状態は実現することは難しい。2重振りの原理を応用することで冷却能力の物理的限界を下げることを出来るということを理論的に示すことが出来た。
- c) 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。また，情報幾何学を用いたアプローチも同時に進め，数理物理的解釈を得た。

B-1) 学術論文

T. HORIKIRI, M. YAMAGUCHI, K. KAMIDE, Y. MATSUO, T. BYRNES, N. ISHIDA, A. LÖFFLER, S. HÖFLING, Y. SHIKANO, T. OGAWA, A. FORCHEL and Y. YAMAMOTO, “Erratum: High-Energy Side-Peak Emission of Exciton-Polariton Condensates in High Density Regime,” *Sci. Rep.* **6**, 35094 (2016).

S. GOTO, “Contact Geometric Descriptions of Vector Fields on Dually Flat Spaces and Their Applications in Electric Circuit Models and Nonequilibrium Statistical Mechanics,” *J. Math. Phys.* **57**, 102702 (41 pages) (2016).

Y.-X. ZHANG, S. WU, Z.-B. CHEN and Y. SHIKANO, “Ground-State Cooling of a Dispersively Coupled Optomechanical System in the Unresolved Sideband Regime via a Dissipatively Coupled Oscillator,” *Phys. Rev. A* **94**, 023823 (11 pages) (2016).

K. G. NAKAMURA, K. OHYA, H. TAKAHASHI, T. TSURUTA, H. SASAKI, S. UOZUMI, K. NORIMATSU, M. KITAJIMA, Y. SHIKANO and Y. KAYANUMA, “Spectrally Resolved Detection in Transient-Reflectivity Measurements of Coherent Optical Phonons in Diamond,” *Phys. Rev. B* **94**, 024303 (7 Pages) (2016).

T. HORIKIRI, M. YAMAGUCHI, K. KAMIDE, Y. MATSUO, T. BYRNES, N. ISHIDA, A. LÖFFLER, S. HÖFLING, Y. SHIKANO, T. OGAWA, A. FORCHEL and Y. YAMAMOTO, “High-Energy Side-Peak Emission of Exciton–Polariton Condensates in High Density Regime,” *Sci. Rep.* **6**, 25655 (11 pages) (2016).

S. GOTO, R. W. TUCKER and T. J. WALTON, “The Dynamics of Compact Laser Pulses,” *J. Phys. A: Math. Theor.* **49**, 265203 (11 pages) (2016).

S. GOTO, R. W. TUCKER and T. J. WALTON, “Classical Dynamics of Free Electromagnetic Laser Pulses,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **369**, 40–44 (2016).

B-3) 総説, 著書

鹿野 豊, 「新著紹介, 今野紀雄, 量子ウォーク (森北出版, 2014)」, *日本物理学会学会誌* **71**, 711 (2016).

B-4) 招待講演

Y. SHIKANO, “Discrete-time quantum walk with feed-forward quantum coin,” 4th-Yokohama Workshop on Quantum Walks at Yokohama National University, Minatomirai Campus, Yokohama, 2016年10月.

Y. SHIKANO, “Visualizing Quantum State by Weak Measurement,” 2nd International Conference on Quantum Foundations 2016 (ICQF16), National Institute of Technology, Patna (India), October 2016.

Y. SHIKANO, “Phonic Interference in Bulk Solid Diamond,” International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science 15 (ISUILS15), Cassis Convention Center “Oustatu Calendal,” Cassis (France), October 2016.

鹿野 豊, 「全体総括と弱測定の実験」, 2016年日本物理学会秋季大会 (物性領域) 「量子測定・弱測定の実験の深化～量子情報・量子基礎論・量子統計への展開～」 (領域1, 領域11), 金沢大学, 金沢, 2016年9月.

鹿野 豊, 「量子動力学シミュレーション入門～量子ウォークを例にして～」, 第61回物性若手夏の学校 (集中ゼミ), ホテルシャレードイン志賀, 山ノ内町, 2016年7月.

鹿野 豊, 「光渦ビームを用いた量子状態の可視化」, 2016年第41回光学シンポジウム, 東京大学生産研究所, 東京, 2016年6月.

Y. SHIKANO, “Observation of Aharonov-Bohm effect with quantum tunneling,” Conference on Concepts and Paradoxes in a Quantum Universe, Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo (Canada), June 2016.

Y. SHIKANO, “Visualizing Quantum State,” EMN Quantum Meeting 2016, Holiday Inn Resort Phuket, Phuket (Thailand), April 2016.

Y. SHIKANO, “On Nonlinear Quantum Walk,” 2016 Joint Mathematics Meetings “AMS Special Session on Quantum Walks, Quantum Markov Chains, Quantum Computation and Related Topics,” Washington State Convention Center, Seattle (U.S.A.), January 2016.

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

科学技術振興機構主催 Gender Summit 10 組織・運営委員会部会委員 (2016–).

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

総合研究大学院大学先導的共同研究ワーキンググループ委員 (2015–).

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

Interdisciplinary Information Sciences, Special Issue “Quantum walk and quantum simulation,” Guest Editor (2016–2017).

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

岩手大学基礎自然科学系公開講演会「20歳からの海外放浪記～私の人生を変えた出来事～」(2016).

東京工業大学大学院理工学研究科基礎物理学専攻・物性物理学専攻キャリアパス講演会 (2016).

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～」(2012).

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–2016年3月.

チャップマン大学量子科学研究所, 客員助教授, 2011年11月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「量子トンネル効果中の測定理論の構築」, 鹿野 豊 (2016年–2018年).

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

若手独立フェローとしての任期も残りわずかとなり、固体中の準粒子ダイナミクスに関する理論と実験に関する結果が出始めている。しかし、今後、どのような方向性に研究を発展させていくのか? 残された任期の中で中長期的な研究の方向性を定めていくことが課題である。一方で、直近の課題としてはヒューマンリソースが極めて少ない中で海外からのインターンシップ学生と共に新しく研究の方向性を推進してきた。これらの研究結果をどのようにまとめていくのか? ということに関しても同様に課題が残っている。

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 °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， $\text{H}_2 + 2\text{e}^- \rightleftharpoons 2\text{H}^-$ 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

G. KOBAYASHI*, **Y. HINUMA**, **S. MATSUOKA**, **A. WATANABE**, **M. IQBAL**, **M. HIRAYAMA**, **M. YONEMURA**, **T. KAMIYAMA**, **I. TANAKA** and **R. KANNO***, “Pure H⁻ Conduction in Oxyhydrides,” *Science* **351**, 1314–1317 (2016).
G. KOBAYASHI*, **Y. IRII**, **F. MATSUMOTO**, **A. ITO**, **Y. OHSAWA**, **S. YAMAMOTO**, **Y. CUI**, **J.-Y. SON** and **Y. SATO**, “Improving Cycling Performance of $\text{Li}[\text{Li}_{0.2}\text{Ni}_{0.18}\text{Co}_{0.03}\text{Mn}_{0.58}]\text{O}_2$ through Combination of Al_2O_3 -Based Surface Modification and Stepwise Pre-Cycling,” *J. Power Sources* **303**, 250–256 (2016).
M. IQBAL, **K. SUZUKI**, **G. KOBAYASHI**, **G. ZHAO**, **M. HIRAYAMA** and **R. KANNO***, “Lithium Ion Conduction in Doped LaLiO_2 System,” *Solid State Ionics* **285**, 33–37 (2016).

B-3) 総説，著書

小林玄器，「ヒドリドイオン導電体」，*固体物理* **51(12)**, 825–830 (2016).
小林玄器，「ヒドリドイオン導電体の開発と電解質材料への応用可能性」，*Energy Device* **3(6)**, 53–58 (2016).

B-4) 招待講演

小林玄器，「ヒドリドイオン導電体の開発とエネルギーデバイスへの応用可能性」，新化学技術推進協会エネルギー分科会講演会，新化学技術推進協会，東京，2016年9月。
G. KOBAYASHI, “Material Design for H⁻ Conductive Oxyhydrides,” Solid State Protonic Conductor–18, Oslo (Norway), September 2016.

小林玄器,「H⁻ 導電性酸水素化物の合成」,セラミックス協会第29回秋季シンポジウム,広島大学,広島,2016年9月.

小林玄器,「La-Sr-Li 系酸水素化物の合成とH⁻ 導電特性」,新学術領域「ナノ構造情報のフロンティア開発——材料科学の新展開」第4回若手の会,つくば,2016年7月.

小林玄器,「La-Sr-Li 系酸水素化物の合成とH⁻ 導電特性」,第4回酸化物研究の新機軸に向けた学際討論会「ナノ酸化物で見える科学と物理:新展開と異分野融合」,京都大学化学研究所,宇治,2016年7月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の開発」,新世代研究所第1回界面ナノ科学研究会,湯沢グランドホテル,新潟,2016年7月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の開発」,パナソニック社内コロキウム,パナソニック株式会社先端研究本部,大阪,2016年5月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の開発」,豊田中央研究所講演会,豊田中央研究所,長久手,2016年4月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の開発と将来展望」,第2回構造科学と新物質探索研究会,早稲田大学,東京,2016年3月.

小林玄器,「水素のアニオンであるヒドリド(H⁻)を伝導する特殊なセラミックスを開発」,元素戦略/希少金属代替材料開発第10回合同シンポジウム,東京国際フォーラム,東京,2016年2月.

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

第51回電池討論会実行委員(2011).

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).

第42回固体イオニクス討論会実行委員(2016).

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」,2016年11月12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-2017年).

C) 研究活動の課題と展望

① 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 ($\sigma \geq 10^{-2} \text{ Scm}^{-1}$) 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。

② 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（EDL = Electric Double Layer Transistor）を行い、熱電特性がモット絶縁体の擬ギャップによって飛躍的に向上することを見出した。また、単分子膜モットFETの作製にも取り組んでいる。
- 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、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、光によってダイボ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ほか、そのスイッチング速度の向上を検討した。また、基板を曲げることによって、歪みの制御にも取り組んでいる。
- 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評価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

Y. KAWASUGI, K. SEKI, Y. EDAGAWA, Y. SATO, J. PU, T. TAKENOBU, H. M. YAMAMOTO and R. KATO, “Simultaneous Enhancement of Conductivity and Seebeck Coefficient in an Organic Mott Transistor,” *Appl. Phys. Lett.* **109**, 233301 (4 pages) (2016).

Y. KAWASUGI, K. SEKI, Y. EDAGAWA, Y. SATO, J. PU, T. TAKENOBU, S. YUNOKI, H. M. YAMAMOTO and R. KATO, “Electron–Hole Doping Asymmetry of Fermi Surface Reconstructed in a Simple Mott Insulator,” *Nat. Commun.* **7**, 12356 (2016).

S. YASUZUKA, S. UJI, T. KONOIKE, T. TERASHIMA, D. GRAF, E. S. CHOI, J. S. BROOKS, H. M. YAMAMOTO and R. KATO, “Shubnikov–de Haas Effect and Angular-Dependent Magnetoresistance in Layered Organic Conductor β ”-(ET) (TCNQ),” *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 084701 (7 pages) (2016).

H. YAMAKAWA, T. MIYAMOTO, T. MORIMOTO, H. YADA, Y. KINOSHITA, M. SOTOME, N. KIDA, K. YAMAMOTO, K. IWANO, Y. MATSUMOTO, S. WATANABE, Y. SHIMOI, M. SUDA, H. M. YAMAMOTO, H. MORI and H. OKAMOTO, “Novel Electronic Ferroelectricity in an Organic Charge-Order Insulator Investigated with Terahertz-Pump Optical-Probe Spectroscopy,” *Sci. Rep.* **6**, 20571 (2016).

B-3) 総説, 著書

川楮義高, 関 和弘, 須田理行, 山本浩史, 「分子性二次元モット絶縁体におけるフィリング制御の新展開」, *固体物理* **51**, 801–814 (2016).

B-4) 招待講演

H. M. YAMAMOTO, “Electronic phase-transitions at an organic interface,” Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications, Okazaki (Japan), November 2016.

H. M. YAMAMOTO, “Superconducting transition at an organic interface,” Thai-Japan Symposium in Chemistry, Chiang Mai (Thailand), November 2016.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Mott-insulators for phase-transition-transistors,” FET2016, Minnesota (U.S.A.), September 2016.

H. M. YAMAMOTO, “Melting of Electronic Crystals in Organic Transistor Interface,” IMPACT-2016, Corsica (France), August 2016.

H. M. YAMAMOTO, “Molecular interface as a tool to investigate unconventional superconductors,” Gordon Conference, Massachusetts (U.S.A.), August 2016.

H. M. YAMAMOTO, “Mott-transition at an organic interface,” ICSM2016, Guangzhou (China), June 2016.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistor driven by phase transition,” KU-IMS joint symposium, Bangkok (Thailand), June 2016.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistor with Superconducting Channel for Electrical, Mechanical and Photochemical Switching,” WCSM-2016, Singapore, March 2016.

H. M. YAMAMOTO, “Molecular superconductor with electric-field, strain, and light,” AsiaCore2016, Beijing (China), February 2016.

H. M. YAMAMOTO, “Molecular Conductors and Its Application to Field-Effect-Transistors,” PACCON2016, Bangkok (Thailand), February 2016.

山本浩史, 「分子性相転移トランジスタにおける電荷制御と歪み効果」, 物理学会(シンポジウム), 金沢, 2016年9月.

H. M. YAMAMOTO, “Molecular conductors and its application to field-effect-transistor,” Russian Academy of Science, Moscow (Russia), September 2016.

山本浩史, 「有機強相関トランジスタにおける界面相転移」, 物性研短期研究会, 柏, 2016年8月.

H. M. YAMAMOTO, “Organic field-effect devices based on strongly correlated electrons,” University of Angers, Angers (France), June 2016.

山本浩史, 「有機強相関エレクトロニクス」, 第8回金属錯体の固体物性最前線, 東北大学, 仙台, 2016年2月.

M. SUDA, “Photo-gated Organic Superconducting Transistor utilizing a Photo-active electric double layer,” Nano S&T-2016, Singapore, October 2016.

M. SUDA, “Photo-controllable Organic Superconducting Transistor,” ISPAC 2016, Kuching (Malaysia), August 2016.

B-6) 受賞, 表彰

H. M. YAMAMOTO, 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).

山本浩史, 科学研究費審査委員表彰 (2016).

須田理行, 分子科学討論会優秀講演賞 (2013).

須田理行, PCCP Prize (2016).

須田理行, 分子科学会奨励賞 (2016).

須田理行, 名古屋大学石田賞 (2016).

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).

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

東京工業大学大学院物質理工学院, 「半導体電子物性」, 2016年12月–2017年1月.

東京工業大学大学院物質理工学院, 特任教授, 2016年4月–.

東北大学大学院理学系研究科, 「強相関電子物理学特論」, 2016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

科研費基盤研究(B), 「溶液プロセスによる二次元単分子層接合デバイスの創成」, 山本浩史 (2016年–2018年).

科研費若手研究(A), 「光誘起電気二重層を利用した新奇超伝導トランジスタの開発」, 須田理行 (2016年–2018年).

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かけ研究, 「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).

B-11) 産学連携

サンテック(株), 「レーザー加工装置の開発」, 山本浩史 (2016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・分子素子の開発と、関連する学術の創出を行っていく。

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) 最近、アームチェア型 CNT の最も短いセクションである $[n]$ シクロパラフェニレン (CPP) の研究が進展しており、複数のグループにより [5]CPP から [18]CPP ままでが合成されている。我々も京大化研・山子グループとの共同研究により、いくつかの興味深い CPP 類縁体 (カーボンナノフープ) を合成した。次なる合成ターゲットとして、チューブ型の曲面グラフェン分子であるカーボンナノベルトが注目されている。1983 年の提案以来、多くの合成化学者が挑戦しているが、いまだに完成の報告はない。我々は DFT 計算により、比較的小さな歪みエネルギーとある程度大きな HOMO-LUMO ギャップをもった分子を設計し、初のナノベルトの完成を目指している。ナノフープはベンゼン環同士がねじれているため、固体での分子間 $\pi-\pi$ 相互作用が生じにくい。一方、ナノベルトはナノフープより長く、CNT と同じく一枚の連続した表面をもつ。このため、2 次元的な分子間 $\pi-\pi$ 相互作用を取りやすく、有機半導体などのユニークな固体物性が期待できる。昨年度は、Scholl 反応による環状フェニレンの酸化的脱水素反応を検討したが、目的とするナノベルト分子を得ることはできなかった。これは分子間の脱水素反応によりオリゴマーが生じること、反応の位置選択性を制御できないこと、および塩化鉄により塩素置換体が生成するためである。今年度は、フッ素置換した環状フェニレンの活性アルミナによる脱フッ化水素反応を検討した。まず、フッ素置換したオクタフェニレンでは、250 °C で反応が進行し、比較的小さな歪みの大きなテトラベンゾ [8] サークュレンを与えた。現在、さらに大きなフッ素化環状フェニレンを合成し、ナノベルト化の検討を行っている。

B-1) 学術論文

E. KAYAHARA, R. QU, M. KOJIMA, T. IWAMOTO, T. SUZUKI and S. YAMAGO, “Ligand-Controlled Synthesis of [3]- and [4]Cyclo-9,9-dimethyl-2,7-fluorenes through Triangle- and Square-Shaped Platinum Intermediates,” *Chem. –Eur. J.* **21**, 18939–18943 (2015).

Y. KURODA, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI, E. KAYAHARA and S. YAMAGO, “Tetracyclo(2,7-carbazole)s: Diatropicity and Paratropicity of Inner Regions of Nanohoops,” *J. Org. Chem.* **81**, 3356–3363 (2016).

B-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「構造物性科学」, 2016 年 12 月 6 日–9 日.

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」が2016年3月で終了した。リング構造をもつCPPは、そのベンゼン環の大きなひずみにもかかわらず、芳香族性が十分に保たれている。共同研究者として、このことを実験的に示すことができたことは、CPP構造の基本的な理解としてよかったと思う。今後は、よりカーボンナノチューブに近いナノベルトの完成と有機デバイスへの応用を目指していきたい。