

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。

鹿 野 豊（特任准教授（若手独立フェロー））（2012年2月16日着任）

A-1) 専門領域：光物性物理学，量子光学

A-2) 研究課題：

- a) 固体中の準粒子ダイナミクス
- b) 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 of 未来」, 2016年日本物理学会秋季大会 (物性領域) 「量子測定・弱測定の理論・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

川楯義高, 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 までは合成されている。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。