

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
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
2016.9. ~ 2017.8.	2017	160	31

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) 酵素反応の反応機構に関する理論研究
- b) ポリセオナミド B の膜への挿入およびイオン透過に関する理論研究
- c) 時計タンパク質 KaiC の概日リズムに関する理論研究
- 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) 遷移状態理論では、反応座標に沿った運動が最も遅く、他のモードは反応座標よりも圧倒的に速く緩和し常に熱平衡にあると仮定する。果たしてそのような描像に基づいて凝縮系の反応が進行しているのだろうか。我々は、cis-trans 異性化の酵素反応を例に、遷移状態と始状態と終状態の両方の状態を繋ぐ反応性軌道を多数発生させ、反応ダイナミクスの解析を進めている。その結果、異性化自体は数ピコ秒で終了し、決して反応座標上の緩慢な酔歩運動ではないことを示すとともに、始状態の平衡分布ではほとんど見出されない構造励起状態を経て反応が進むことを見出した。さらに、古くから提唱されている酵素による遷移状態の安定化に加え、構造励起状態の形成により単純な確率論的熱励起で反応が進行しないことや遷移状態での反応軌跡の再交差の抑制などが明らかになってきた。
- b) 一分子速度論に基づく化学反応の研究として、ポリセオナミド B (pTB) のイオン透過機構の解析を展開している。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。また、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解明されている。一分子反応論に基づく 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、水や膜内の pTB の構造およびその揺らぎ等の解析を行った。現在は、膜侵入の自由エネルギーおよびその動的過程の解析を進めている。
- c) 生体分子系の機能の発現機構に関する研究も進めている。その一例として、シアノバクテリアの概日リズムを担う Kai タンパク質系の概日リズムを解析している。この系の概日リズムは KaiA, KaiB, KaiC の 3 つのタンパク質により制御され、とくに KaiC が重要であることが知られている。最近、秋山らは、KaiC の構造を解明するとともに、概日リズムの周期と ATP 加水分解能との相関などを解明した。我々は、原子レベルでの ATP 加水分解反応機構の解析から、素反応およびタンパク質の構造変化を考慮した数理モデルによる概日リズムの解析まで、生体分子系の機能としての KaiC の概日周期の発現に至る幅広い時間・空間スケールの解析を進めている。
- d) 生体分子系の機能の発現機構の解析として、エネルギー移動の解析も行っている。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解明のままである。Fenna-Matthews-Olson (FMO) タンパク質を例に

励起エネルギー移動の解析を行い、各色素のエネルギー準位およびその揺らぎの解析手法の開発を進めている。最近、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、各色素の構造や色素周辺的环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) 揺らぎが如何に反応や機能に関わっているかに関する上記の研究に加え、水を例に揺らぎの熱力学的性質への影響について解析を行っている。水は常温付近で様々な熱力学異常性を示し、融点以下でその異常性はさらに増す。そのため、水の異常性の起源は過冷却状態にあると考えられているが、結晶化が容易に進行するため実験的検証は非常に困難である。我々は、室温から極度の過冷却状態にいたる非常に幅広い温度領域の構造・ダイナミクスを系統的な解析により、ある温度以下では室温状態で主要な局所的高密度状態が不安定化しスピノダル分解的な挙動を示すことを解明した。さらに、水のガラス転移温度が低い物理的起源に対する提案を行った。

B-1) 学術論文

M. OKUDA, M. HIGASHI, K. OHTA, S. SAITO and K. TOMINAGA, “Vibrational Frequency Fluctuations of Ionic Vibrational Probe in Water: Theoretical Study with Molecular Dynamics Simulation,” *Chem. Phys. Lett.* **683**, 547–552 (2017).

B-3) 総説, 著書

森 俊文, 斉藤真司, 「超長時間シミュレーションで見るタンパク質のフォールディング過程」, *生物物理* **57**, 030–032 (2017).

B-4) 招待講演

甲田信一, 「素過程に立脚した時計タンパク質概日リズムの反応モデル: 反応から機能へ」, 研究会「凝縮系の理論化学」, 那覇, April 2017.

T. MORI, “Molecular study of the interplay between chemical reactions and protein conformational changes in biomolecular systems,” KAKENHI International Symposium on “Studying the Function of Soft Molecular Systems,” Sapporo, June 2017.

S. SAITO, “Supercooled water: Fluctuation, glass transition, and quantum effects,” Korea-Japan Molecular Symposium 2017, Pusan (Korea), July 2017.

S. KODA and S. SAITO, “Reaction model for circadian rhythm of Kai system considering elementary processes,” ANSCSE21, Pathum Thani (Thailand), August 2017.

森 俊文, 「Transition path sampling 法による酵素反応の遷移ダイナミクス解析」, 「レアイベントの計算科学」研究会, 熱海, August 2017.

甲田信一, 「時計タンパク質概日リズムの理論研究: ピコ秒から 24 時の時間階層」, 新学術領域「柔らかな分子系」第 24 回ワークショップ「若手研究者が描く分子理論の未来」, 仙台, September 2017.

森 俊文, “Deciphering the heterogeneous dynamics of proteins from the analysis of millisecond-long molecular dynamics simulations,” 第 55 回日本生物物理学会年会 “Softness and functions of biological molecules under various environments” シンポジウム, Kumamoto, September 2017.

S. SAITO, “Supercooled water: Fluctuation, glass transition, and vibrational entropy,” Max-Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter, Hamburg (Germany), September 2017.

S. KODA and S. SAITO, “Reaction model for circadian rhythm of Kai system by considering reactions and conformational changes,” APCTCC8, IIT Bombay, Mumbai (India), December 2017.

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).

Pacificchem2020国内実行委員 (Computational and Theoretical 分野) (2017–2020).

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 (2015–2017).

European Research Council (ERC) 審査員 (2016–2017).

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

神戸大学大学院理学研究科, 「量子化学特論」, 2017年6月22日-23日.
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」, 2017年12月12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」, 齊藤真司 (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」, 齊藤真司 (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」, 齊藤真司 (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」, 齊藤真司 (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」, 齊藤真司 (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」, 齊藤真司 (2006年度-2009年度).

C) 研究活動の課題と展望

我々は、ダイナミクスに非常に敏感な多時間相関関数を利用し、液体の高速な揺らぎ・緩和、過冷却液体の動的不均一性、生体分子の幅広い時間スケールを持つ運動の動的結合の様相などの解析を行ってきた。これらの揺らぎや緩和過程の理論研究を踏まえ、幅広い時空間スケールをもつ複雑な揺らぎの中から、化学反応や機能および熱力学的性質が如何に生み出されるかについて理論・計算科学研究を進めている。具体的には、生体分子系における化学反応の描像の獲得と従来の理論における反応の描像の検討に加え、イオンチャネルを例に拡散・反応過程およびMichaelis-Menten理論を検討し、一分子反応論の観点から凝縮系反応理論の成立の基盤の解明を目指している。また、生体分子の機能に関する解析として、原子・分子レベルからタンパク質系レベルにいたる時計タンパク質KaiCの概日リズムの発現機構、FMOタンパク質における励起エネルギー移動機構の解析を進めている。これらの研究に加え、水の特異的物性発現の起源の研究をさらに進める。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運動が如何に変化するのか等に関する理論研究を推進する。

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・電子融合デバイスの理論設計
- 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
- e) 光励起電子ダイナミクス第一原理計算プログラム SALMON の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 最近では，数～十数 nm 程度の極めて精密な高次ナノ構造体を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・電子融合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と，その理論に基づく光励起電子ダイナミクス第一原理計算プログラムを開発してきた。当初は，このプログラムは GCEED と名付けていたが，孤立系，ナノ構造体，周期系バルク，表面・界面等，様々な系の光応答を取り扱うために，GCEED を大幅に改変し，SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) として開発を進めた。SALMON を用いて金属有機構造体 (MOF) 中のアセチレンを二倍波励起できることを実証した。また，シリコン薄膜を対象として，始状態と終状態が異なる波数を持つバンド間の波数励起ができることを実証した。いずれの光励起も近接場光励起に起因するものである。
- 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 SALMON 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ている。本年度は，MoS₂-Graphene の光励起過程の詳細を明らかにした。
- c) プラチナ，ロジウム，パラジウムを用いた三元触媒は，自動車排ガス浄化触媒として使われているが，いずれの金属も高価であり，これらの金属を豊富に存在する安価な物質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) 分子動力学計算法を用いて，CeO₂ 表面に Cr と Cu がドーピングされている系の 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。本年度も，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研究を進めた。

- e) 孤立系, ナノ構造体, 周期系バルク, 表面・界面等様々な系を対象として, その光励起電子ダイナミクスの計算を行う第一原理超並列計算プログラム SALMON の開発を行った。ソースコードまで含めて公開した。<http://salmon-tddft.jp>

B-1) 学術論文

T. YATSUI, H. SAITO and K. NOBUSADA, "Angstrom-Scale Flatness Using Selective Nano-Scale Etching," *Beilstein J. Nanotechnol.* **8**, 2181–2185 (2017).

T. YATSUI, M. YAMAGUCHI and K. NOBUSADA, "Nano-Scale Chemical Reactions Based on Non-Uniform Optical Near-Fields and Their Applications," *Prog. Quantum Electron.* **55**, 166–194 (2017).

K. KOIZUMI, M. HATAKEYAMA, M. BOERO, K. NOBUSADA, H. HORI, T. MISONOU and S. NAKAMURA, "How Seaweeds Release the Excess Energy from Sunlight to Surrounding Sea Water," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 15745–15753 (2017).

M. NODA, M. YAMAGUCHI and K. NOBUSADA, "Second Harmonic Excitation of Acetylene by the Optical Near Field Generated in a Porous Material," *J. Phys. Chem. C* **121**, 11687–11692 (2017).

K. IIDA, M. NODA and K. NOBUSADA, "Development of Theoretical Approach for Describing Electronic Properties of Hetero-Interface Systems under Applied Bias Voltage," *J. Chem. Phys.* **146**, 084706 (10 pages) (2017).

K. IIDA and K. NOBUSADA, "Atomically Modified Thin Interface in Metal-Dielectric Hetero-Integrated Systems: Control of Electronic Properties," *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 145503 (8 pages) (2017).

K. KOIZUMI, K. NOBUSADA and M. BOERO, "An Atomic-Level Insight into the Basic Mechanism Responsible for the Enhancement of the Catalytic Oxidation of Carbon Monoxide on a Cu/CeO₂ Surface," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 3498–3505 (2017).

K. KOIZUMI, K. NOBUSADA and M. BOERO, "Simple but Efficient Method for Inhibiting Sintering and Aggregation of Catalytic Pt Nanoclusters on Metal-Oxide Supports," *Chem. –Eur. J.* **23**, 1531–1538 (2017).

B-3) 総説, 著書

T. YATSUI and K. NOBUSADA, "Near-Field Assisted Chemical Reactions and Its Applications," *Progress in Nanophotonics* **4**, 57–86 (2017).

B-4) 招待講演

信定克幸, 「近接場光励起により発現する新奇光機能場の計算科学的設計」, 第4回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会, コクヨホール, 東京品川, 2017年11月.

B-5) 特許出願

特願 2017-159786, 「可視光プラズモニック合金ナノ粒子, その製造方法, 及びその用途」, 佐藤良太, 寺西利治, 川脇徳久, 信定克幸, 飯田健二, 2017年.

B-6) 受賞, 表彰

信定克幸, 平成 28 年度実施課題における HPCI 利用研究課題優秀成果賞 (2017).

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–).

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).

理論化学討論会世話人幹事 (2017–).

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).

筑波大学計算科学研究センター共同研究委員会委員 (2015–).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2016–).

その他

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).

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, 2006年6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–2012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-2016年).

科研費基盤研究(B),「近接場光励起を用いた光高機能ナノ物質の計算科学的設計」, 信定克幸 (2017年-2020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。また、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。我々は、既にその様な第一原理計算プログラム SALMON を世界にささかけて開発済みである。今後は、ナノ光応答理論と計算科学的手法 SALMON 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。

*) 2018年1月15日逝去

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) 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，理論的な取り扱いには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。
- 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，関連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

T. YANAI, Y. KURASHIGE, M. SAITOW, J. CHALUPSKÝ, R. LINDH and P.-A. MALMQVIST, “Influence of the Choice of Projection Manifolds in the CASPT2 Implementation,” *Mol. Phys.* **115**, 2077–2085 (2017).

R. SATO, H. KIOTH-NISHIOKA, T. YANAI and Y. SHIGETA, “Theoretical Analyses on Triplet–Triplet Annihilation Process of 9,10-Diphenylanthracene in Solution,” *Chem. Lett.* **46**, 873–875 (2017).

Y. KOBAYASHI, H. OKAJIMA, H. SOTOME, T. YANAI, K. MUTOH, Y. YONEDA, Y. SHIGETA, A. SAKAMOTO, H. MIYASAKA and J. ABE, “Direct Observation of the Ultrafast Dynamic Evolution of Open-Shell Biradical Contributions in Photochromic Radical Dimer,” *J. Am. Chem. Soc.* **139**, 6382–6389 (2017).

K. MIYATA, Y. KURASHIGE, K. WATANABE, T. SUGIMOTO, S. TAKAHASHI, S. TANAKAI, J. TAKEYA, T. YANAI and Y. MATSUMOTO, “Coherent Singlet Fission Activated by Symmetry Breaking,” *Nat. Chem.* **9**, 983–989 (2017).

X.-G. XIONG and T. YANAI, “Projector Augmented Wave Method Incorporated into Gauss-Type Atomic Orbital Based Density Functional Theory,” *J. Chem. Theory Comput.* **13**, 3236–3249 (2017).

T. YANAI, M. SAITOW, X.-G. XIONG, Y. KURASHIGE, J. CHALUPSKÝ, S. GUO and S. SHARMA, “Multistate Complete-Active-Space Second-Order Perturbation Theory Based on Density Matrix Renormalization Group Reference States,” *J. Chem. Theory Comput.* **13**, 4829–4840 (2017).

B-4) 招待講演

T. YANAI, “Quantum chemistry with correlated many-electron theory,” OKAZAKI - STRASBOURG Symposium, Institute of Physics and Chemistry of Materials, Strasbourg (France), May 2017.

T. YANAI, “Projector Augmented Wave Method Incorporated into Gauss-type Atomic Orbital Based Density Functional Theory,” New Frontiers in Electron Correlation, Telluride, CO (U.S.A.), June 2017.

T. YANAI, “Quantum chemistry with highly entangled many-electron theory,” 2017 Summer Symposium of KCS-Physical Chemistry Division and 2017 Korea-Japan Molecular Science Symposium, Busan (Korea), July 2017.

T. YANAI, “Projector Augmented Wave Method Incorporated into Gauss-Type Atomic Orbital Based Density Functional Theory,” The 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, Munich (Germany), August–September 2017.

T. YANAI, “Advanced Multireference Electronic Structure Theory with ab initio Density Matrix Renormalization Group,” The 8th Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry, Mumbai (India), December 2017.

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).

T. YANAI, The 2017 Pople Medal of Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (2017).

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).

日本学術振興会外国人招へい研究者(長期)受入: Dr. X.-G. Xiong (中国科学院上海応用物理研究所) 期間1年,柳井 毅 (2016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), 公募班代表「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フォトクロミック分子への応用」,柳井 毅 (2017年度–2018年度).

科学技術振興機構さきがけ研究(マテリアルズインフォ),「人工ニューラルネットワーク理論に基づく第一原理量子多体シミュレータの開発」,柳井 毅 (2017年度–2020年度).

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) AMO 物理学に基づく分子系の観測と制御の理論研究
- b) 量子散逸系のダイナミクス理論に基づく凝縮相分子系における反応過程の理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 近年、冷却原子系の分野を中心に Floquet Engineering と呼ばれる考え方が注目を集めている。Floquet Engineering では、注目する系を外部から周期的に駆動することで制御し、望みのハミルトニアンや量子状態を実現し、未開の物理を探索するための舞台を与えている。本研究課題では、Floquet Engineering の枠組を凝縮相分子系におけるエネルギー移動や電荷移動など散逸系の量子ダイナミクス現象に適用し、Floquet Engineering を用いて分子間のエネルギー移動や電荷移動を操作し得ることを見出した。理論解析と数値解析により、凝縮相のような散逸や揺らぎに曝された量子系においても Floquet Engineering は頑健に機能することを明らかにした。
- b) 近年の分光実験により、緑色植物等の光化学系 II (PSII) 反応中心における初期電荷分離は数百フェムト秒の時間スケールで起こることが示唆されているが、これは比較的良好に理解されている紅色細菌の反応中心に比べて約 10 倍も速い。本研究課題では、タンパク質の構造・色素の配置に関する小さな差異と光化学系 II の超高速電荷分離反応の実現の関係性について研究を進めている。最近の二次元電子分光データは色素の分子内振動が PSII の電荷分離を促進する可能性を示唆しているが、電荷分離状態は光学禁制であるため詳細な情報を分光学的に得ることは容易ではない。我々は分子シミュレーションの助けを借りながら、分子内振動モードによる PSII 電荷分離への影響を量子ダイナミクス計算と分光スペクトルのモデリングに基づいて解析を進めている。

また、有機薄膜太陽電池はフレキシブルかつ低コストのエネルギー源として期待されている一方で、そのエネルギー変換効率は 10% 程度にとどまり実用化には更なる改善が必要である。有機物質では、その低誘電率のため室温の熱エネルギーよりも遥かに大きな電子・正孔の強束縛状態からの電荷分離過程が含まれており、その詳しい機構は未だ明らかではない。本研究課題では、有機物質における電子フォノン相互作用によるポーラロン形成および量子コヒーレンスとそのデコヒーレンスとの競合に着目し、ポーラロンの形成過程を正しく記述する量子ダイナミクス計算を行った。その結果、ポーラロン形成がコヒーレントな超高速電荷分離過程からインコヒーレントな電荷再結合過程への遷移を引き起こし、これにより電荷再結合を遅らせることで電荷分離状態が長時間維持され得ることを明らかにした。

B-1) 学術論文

Y. FUJHASHI, L. CHEN, A. ISHIZAKI, J. WANG and Y. ZHAO, "Effect of High-Frequency Modes on Singlet Fission Dynamics," *J. Chem. Phys.* **146**, 044101 (11 pages) (2017).

B-3) 総説, 著書

G. D. SCHOLES, G. R. FLEMING, L. X. CHEN, A. ASPURU-GUZI, A. BUCHLEITNER, D. F. COKER, G. S. ENGEL, R. VAN GRONDELLE, A. ISHIZAKI, D. M. JONAS, J. S. LUNDEEN, J. K. MCCUSKER, S. MUKAMEL, J. P. OGILVIE, A. OLAYA-CASTRO, M. A. RATNER, F. C. SPANO, K. B. WHALEY and X. Y. ZHU, "Using Coherence to Enhance Function in Chemical and Biophysical Systems," *Nature* **543**, 647–656 (2017).

B-4) 招待講演

石崎章仁, 「HFSP 2017年若手研究 Grant」, 2017年度生命科学系学会合同年次大会 AMED フォーラム～HFSP 国際 Grant トへの招待～, 神戸ポートピアホテル, 兵庫県神戸市, 2017年12月.

石崎章仁, 「量子散逸系として見る光合成光捕集系」, 2017年度生命科学系学会合同年次大会, 神戸ポートピアホテル, 兵庫県神戸市, 2017年12月.

A. ISHIZAKI, "Quantum dynamical aspects in biophysical and material systems," 1st QST International Symposium "Quantum Life Science," Tokyo Bay Makuhari Hall, Makuhari (Japan), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," University of Leeds, Leeds (U.K.), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," University of Manchester, Manchester (U.K.), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," University College London, London (U.K.), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," University of Oxford, Oxford (U.K.), July 2017.

A. ISHIZAKI, "Theory of real-time quantum dissipative dynamics and its application to photosynthetic light harvesting systems," Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart (Germany), July 2017.

石崎章仁, 「多光子分光法の可能性——量子もつれ分光法は可能か——」, 第14回 AMO 討論会, 東京電気通信大学, 東京都府中市, 2017年6月.

石崎章仁, 「光合成初期過程は量子力学を巧みに利用している? ～理論家の隙間産業研究～」, すぐには役に立たない!? 研究講座～自然の力でもものづくり～, 科学技術振興機構東京本部別館, 東京都千代田区, 2017年6月.

石崎章仁, 「量子散逸系の動力学理論とその化学・生物物理ダイナミクスへの展開」, 第271回分子工学コロキウム, 京都大学, 京都府京都市, 2017年5月.

石崎章仁, 「量子散逸系のダイナミクス理論とその光合成初期過程への展開」, 理化学研究所「物質階層原理研究」第1回春期研究会, 御殿場高原ホテル, 静岡県御殿場市, 2017年5月.

石崎章仁, 「凝縮相量子ダイナミクスの理論とその光合成初期過程への展開」, 近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会(第98回例会), 大阪科学技術センター, 大阪府大阪市, 2017年2月.

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」, 東京大学, 東京都文京区, 2017年1月.

B-6) 受賞, 表彰

石崎章仁, 平成 29 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞 (2017).

G. SCHLAU-COHEN, A. ISHIZAKI and M. JOHNSON, Young Investigator Grant 2017 from Human Frontier Science Program (2017).

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).

A. ISHIZAKI, Short-term Fellowship at Wissenschaftskolleg zu Berlin (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 12 領域運営委員 (2017).

日本化学会東海支部常任幹事 (2017).

学会の組織委員等

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).

B-8) 大学での講義, 客員

理化学研究所環境資源科学研究センター生体機能触媒研究チーム, 客員研究員, 2016 年 5 月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「光合成初期過程の効率性と恒常性を制御する電荷分離・再結合反応の理論研究」, 石崎章仁 (2017 年–2021 年).

Human Frontier Science Program, Young Investigator Grant 2017 “Regulation of photosynthetic light harvesting: how does protein conformation control photophysics?” G. Schlau-Cohen, A. Ishizaki and M. Johnson (2017 年–2020 年).

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).

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

近年,生体系や有機物質系における電荷及びエネルギー移動において,その量子性が移動効率の最適化に関して重要であることが理論的及び実験的に指摘されてきている。これらの動力的過程の性質を十分に明らかにすることは自然に対する理解を深めるだけでなく,微小系の作成及び制御技術の飛躍的進歩と相まり,最適な人工デバイス設計に対する指針を与えるうえでも重要である。従って,分子系の量子性と環境の熱揺らぎを適切に取り扱うことは必要不可欠であるが,これらの領域はまた様々な非自明かつ魅力的な物理現象が生じる舞台となることも明らかになってきている。我々は,これらの非自明的な物理現象が,着目している分子系での電荷,エネルギー,及び熱移動のような動力的過程において本質的役割を果たす可能性を考慮しつつ,様々な素過程の役割を明らかにし,物理現象に対する明瞭かつ本質的理解を深めることを目指したい。

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) 共鳴状態は緩和経路が存在する準安定状態であり，電子状態では，準安定アニオン，多価イオン，内殻ホール状態などがある。これらの電子共鳴状態は，理論的には散乱理論， L^2 理論，外挿法で研究されるが，複素吸収ポテンシャル法 (CAP, Complex Absorbing Potential) は L^2 理論に分類され，一般の電子相関理論を利用できるという長所がある。CAP法ではハミルトニアンに複素吸収ポテンシャルを加え，外部に散乱する波動関数を吸収して束縛状態の問題に帰着し，共鳴位置と共鳴幅を計算する。また外挿法の一つに解析接続結合定数法 (ACCC, Analytic Continuation of the Coupling Constant) がある。我々は，電子共鳴状態を計算する方法として射影型 CAP/SAC-CI法や ACCC SAC-CI法を開発し，様々な形状をもつ分子に適用できる CAPとしてポロノイ・ポテンシャルを開発した。本年度は，CAP/SAC-CI法をニトリル基またはイソニトリル基を含む分子の電子共鳴状態に適用し，共鳴状態の through-bond 相互作用に注目して，電子透過スペクトルに新しい帰属を与えた。また，ACCC SAC-CI法における解析接続の方法を検討し，いくつかの分子系でベンチマーク計算を実施し，新しい安定な解析接続の方法を提案した。
- b) 分子は超高压下において新奇な物性や反応を示す。これまで高压下における固体の相転移や凝縮系における物性について固体電子論や第一原理動力学法を用いて理論研究がなされてきたが，分子系の高压下の物性や反応については有用な方法が少なく，理論研究は多くない。我々は独自の PCM XP (extreme pressure) 法を開発し，SAC-CI法に導入することにより，分子の励起状態における圧力 (GPa オーダー) の効果について研究を行った。本年度は，PCM XP法を用いて，高压下におけるフラレーンとブタジエンの Diels-Alder 反応を研究した。本反応ではフラレーンの骨格構造に起因する [6,6] と [5,6] の配位位置における異なる生成物の可能性があり，通常 [6,6] 位置の反応が進行する。本研究によって，超高压下では本反応のエネルギーバリアが低くなり，[6,6] の反応では約 2 GPa，[5,6] の反応では約 10 GPa でバリアが消失することが見出された。またバリアが低くなる要因として，電子的効果とキャビテーション効果が同程度にあることが理論解析から示された。とくに通常は起きない [5,6] タイプの反応が高压下で進行することは興味深く，高压を利用した反応制御が期待できる。
- c) 担持合金微粒子触媒では，微粒子の合金効果および微粒子-担体相互作用が触媒活性の鍵となる。我々はこれまで合金効果および担体効果について凝縮相微粒子触媒 (Au-Pd:PVP) や担持微粒子触媒 (Ag/Al₂O₃) などの触媒活性について系統的に理論研究を実施してきた。本年度は，Cu-M 合金微粒子の構造と電子状態について，Cu_{38-n}M_n (M = Ru, Rh, Pd, Ag, Os, Ir, Pt, Au; n = 1, 2, 6) を理論モデルとして DFT 計算によって系統的に研究した。Cu₃₇M₁ の結果から偏析エネルギー (segregation energy) が金属 M の d 軌道占有数の変化と相関することを見出した。Cu₃₇M₂ および Cu₃₇M₆ の結果から d 軌道に非占軌道がある 8 族・9 族の原子 (M = Ru, Rh, Os, Ir) では M 原子をコアとするコア・シェル構造が安定であり，d 軌道がほぼ占有される 10 族・11 族の原子 (M = Pd, Ag, Pt, Au) では固溶体構造が安定

である結果を得た。ここで得られた規則は一般的に適用が可能であり、合金微粒子の構造安定性を予測する上で重要な知見である。また、凝縮コロイド相金クラスターによる一級アミンのヒドロアミノ化反応の触媒サイクルの反応機構を明らかにした。

- d) 金属酸化物表面に高分散された金属は、担体表面にドーブされ単核金属の反応場を形成する。アルミナ表面では Al が他の金属に置換されることによって、金属周辺で表面酸素が活性化され、高い反応性を示す。最近、アルミナ表面に Pd 単原子をドーブした Pd₁/γ-Al₂O₃ が CO 酸化に高い触媒活性を示すことが見出された。ここで Pd を汎用元素に代替することができれば、完全に希少元素フリーの触媒を開発することができる。本研究では、M₁/γ-Al₂O₃ (M = Pd, Fe, Co, Ni) における CO 酸化の触媒活性について周期境界 DFT を用いて研究を実施した。その結果、表面にドーブされた金属が II 価をとる M = Ni が律速段階において最も低いエネルギーバリアを持つ結果が得られ、高い活性をもつ可能性が理論計算から示唆された。一方、III 価をとる金属 M = Fe, Co ではエネルギーバリアは高くなる。本反応では中間体における金属と表面酸素の距離や、吸着 CO への表面からの電子移動および電荷分極が重要な因子であることが分かった。この理論計算の結果を受けて、ESICB の実験グループによって実験が行われ、アルミナに Ni を高分散した系において触媒活性が高いことが見出された。本結果は、表面における単核金属サイトの活性化および表面構造の乱れの点で重要な知見であり、理論と実験の協働による重要な研究成果である。また、アルミナ表面における Co クラスターの安定性および凝集抑制効果に関して研究を実施した。

B-1) 学術論文

K. TAKAGI, K. ITO, Y. YAMADA, T. NAKASHIMA, R. FUKUDA, M. EHARA and H. MASU, “Synthesis and Optical Properties of Excited-State Intramolecular Proton Transfer Active π -Conjugated Benzimidazole Compounds: Influence of Structural Rigidification by Ring Fusion,” *J. Org. Chem.* **82**, 12173–12180 (2017).

R. ZHAO, K. YUAN, S. ZHAO, X. ZHAO and M. EHARA, “Quantum Chemical Insight into La₂C₉₆: Metal Carbide Fullerene La₂C₂@C₉₄ versus Dimetallofullerene La₂@C₉₆,” *Inorg. Chem.* **56**, 11883–11890 (2017).

R. ZHAO, K. YUAN, S. ZHAO, M. EHARA, S. NAGASE, J. M. POBLET and X. ZHAO, “Deciphering the Role of Long-Range Interaction in Endohedral Metallofullerenes: A Revisit to Sc₂C₇₀,” *J. Phys. Chem. C* **121**, 20481–20488 (2017).

P. ZHAO, X. ZHAO and M. EHARA, “Theoretical Insight into Sc₂C₇₆: Carbide Clusterfullerene Sc₂C₂@C₇₄ versus Dimetallofullerene Sc₂@C₇₆,” *Inorg. Chem.* **56**, 10195–10203 (2017).

K. BOBUATONG, H. SAKURAI and M. EHARA, “Intramolecular Hydroamination by a Primary Amine of an Unactivated Alkene on Gold Nanoclusters: A DFT Study,” *ChemCatChem* **9**, 4490–4500 (2017). (Front Cover, Cover Profile)

K. TAKAGI, K. ITO, Y. YAMADA, T. NAKASHIMA, R. FUKUDA, M. EHARA and D. TAKEUCHI, “Synthesis and Optical Properties of Fused π -Conjugated Imidazole Compounds,” *Chem. Lett.* **46**, 1372–1375 (2017).

T. YANG, R. FUKUDA, R. CAMMI and M. EHARA, “Diels–Alder Cycloaddition of Cyclopentadiene and C₆₀ at the Extreme High Pressure,” *J. Phys. Chem. A* **121**, 4363–4371 (2017).

N. TAKAGI, K. ISHIMURA, M. MATSUI, R. FUKUDA, M. EHARA and S. SAKAKI, “Core-Shell Versus Other Structures in Binary Cu_{38-n}M_n Nanoclusters (M = Ru, Rh, Pd, Ag, Os, Ir, Pt, and Au; n = 1, 2, and 6): Theoretical Insight into Determining Factors,” *J. Phys. Chem. C* **121**, 10514–10528 (2017).

T. SOMMERFELD, J. B. MELUGIN, P. HAMAL and M. EHARA, “Resonance Energies and Lifetimes from the Analytic Continuation of the Coupling Constant Method: Robust Algorithms and a Critical Analysis,” *J. Chem. Theory Comput.* **13**, 2550–2560 (2017).

T. YANG, R. FUKUDA, S. HOSOKAWA, T. TANAKA, S. SAKAKI and M. EHARA, “A Theoretical Investigation on CO Oxidation by Single-Atom Catalysts $M_1/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ ($M = \text{Pd, Fe, Co, and Ni}$),” *ChemCatChem* **9**, 1222–1229 (2017).

M. SAVARESE, U. RAUCCI, R. FUKUDA, C. ADAMO, M. EHARA, N. REGA and I. CIOFINI, “Comparing the Performance of TD-DFT and SAC-CI Methods in the Description of Excited States Potential Energy Surfaces: An Excited State Proton Transfer Reaction as Case Study,” *J. Comput. Chem.* **38**, 1084–1092 (2017).

T. YANG and M. EHARA, “Computational Studies on Reaction Mechanism and Origins of Selectivities in Nickel-Catalyzed (2+2+2) Cycloadditions and Alkenylative Cyclizations of 1,6-Ene-Allenenes and Alkenes,” *J. Org. Chem.* **82**, 2150–2159 (2017).

Y. MORISAWA, S. TACHIBANA, A. IKEHATA, T. YANG, M. EHARA and Y. OZAKI, “Changes in the Electronic States of Low-Temperature Solid *n*-Tetradecane: Decrease in the HOMO–LUMO Gap,” *ACS Omega* **2**, 618–625 (2017).

R. FUKUDA, N. TAKAGI, S. SAKAKI and M. EHARA, “Structures of Bimetallic Copper–Ruthenium Nanoparticles: Incoherent Interface and Surface Active Sites for Catalytic Nitric Oxide Dissociation,” *J. Phys. Chem. C* **121**, 300–307 (2017).

T. YANG and M. EHARA, “Probing the Electronic Structures of Co_n ($n = 1\text{--}5$) Clusters on $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ Surfaces Using First-Principles Calculations,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 3679–3687 (2017).

M. EHARA, Y. KANAZAWA and T. SOMMERFELD, “Low-Lying π^* Resonances Associated with Cyano Groups: A CAP/SAC-CI Study,” *Chem. Phys.* **482**, 169–177 (2017). (special issue for 70th birthday of L. S. Cederbaum)

B-3) 総説, 著書

江原正博, 櫻井英博, 「複雑系の理論計算化学: Au/Pd 合金クラスター触媒」, 「触媒研究における計算科学の利用」, *触媒* **59**(4), pp. 181–186 (2017).

江原正博, 「計算化学」, 「触媒化学 基礎から応用まで」, 田中庸裕, 山下弘巳編, 講談社; 東京, 第 11.4 章, pp. 250–258 (2017).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

M. EHARA, “Electronic Resonance States Studied by CAP/SAC-CI and ACCC SAC-CI,” The 8th Asian Pacific Conference of Theoretical & Computational Chemistry (APCTCC), Mumbai (India), December 2017.

M. EHARA, “Theoretical Molecular Spectroscopy using SAC-CI,” The 2nd International Symposium on Quantum Chemistry at Kwansai Gakuin University, Nishinomiya, Hyogo (Japan), November 2017.

M. EHARA, “Interface in Supported Nanocluster Catalysts,” First Joint Symposium of IMS-NANOTECH, Bangkok (Thailand), October 2017.

M. EHARA, “Structure and Catalytic Activity of Nanocluster Catalysts,” The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE21), Bangkok (Thailand), August 2017.*

M. EHARA, “Theoretical Chemistry for Complex Systems: Nanocluster and Heterogeneous Catalysts,” Forum for Molecular Science, Xi’an Jiaotong University, Xi’an (China), June 2017.

M. EHARA, “Theoretical Chemistry for Complex Systems: Approach from Accurate Electronic Structure Theory,” Fudan University, Shanghai (China), April 2017.

M. EHARA, "Element Strategy for Catalysts and Batteries," Shanghai University, Shanghai (China), April 2017.

M. EHARA, "Relevance of Interface Region in Supported Nanocluster Catalysts," The 5th Modeling of Chemical and Biological Reactivity (MCBR-5), Chennai (India), February 2017.

M. EHARA and T. SOMMERFELD, "Electronic Resonance States Studied by CAP/SAC-CI and ACCC SAC-CI," Recent Advances in Many-Electron Theory (RAMET) 2017, Goa (India), February 2017.

江原正博, 「電子共鳴状態の理論研究」, 分子科学討論会, 東北大学, 仙台, 2017年9月.

江原正博, 「紫外・遠紫外領域に観測される電子状態と分子間相互作用の理論的解析」, 日本分光学会遠紫外分光部会第2回講演会「拓かれる紫外・遠紫外分光法の研究領域」, 東京, 2017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).

日本化学会東海支部会計幹事 (2016).

日本化学会学術賞・進歩賞選考委員会分野別選考委員(複合領域) (2017).

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).

The VIIth Japan-Czech-Slovakia (JCS) Symposium on Theoretical Chemistry, Prague, Czech, Organization Committee (2017–2018).

The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, International Advisory Board (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).
日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2016–2017).
日本学術振興会国際事業委員会書面審査員・書面評価員 (2016).
日本学術振興会卓越研究員候補者選考委員会書面審査員 (2016–2017).

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).

The Chemical Record, Special Issue of “Li and Na Rechargeable Batteries,” Guest Editor (2017–2018).

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 (2016–2017).

量子化学ウインタースクール世話人 (2011–2017).

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 (2015–2017).

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).

物質機能の解明・開拓先端研究統合教育プログラムWG 委員 (2016–2017).

総合研究大学院大学物理科学コース別教育プログラム運営委員 (2016–2017).

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」, 2017年4月20日–21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).

B-11) 産学連携

自動車用内燃機関技術研究組合,「計算化学による次世代ゼオライトの構造提案」, 江原正博 (2017年–2018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、光機能性分子の電子過程や金属微粒子・バルク触媒を主たる対象とした理論研究を実施し、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、さらに開発を進める必要がある。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する。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、金属微粒子触媒、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) 分子動力学シミュレーションによるアミロイド β 全長の二量体形成
- b) 密度汎関数強束縛法を用いた金属イオンによるアミロイド β ペプチドの凝集
- c) 定温定圧レプリカ置換法による高圧下でのシニョリンの特異な振る舞いの解明
- d) 理論的研究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 β)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。アミロイド線維を形成したA β ペプチドの構造はNMR実験などでわかっているが、その前段階であるオリゴマーの構造はまだ明らかになっていない。オリゴマー形成の初期段階である二量体形成の機構を明らかにするために、水中のA β 42二分子およびA β 40二分子についてハミルトニアンレプリカ置換分子動力学シミュレーションを行った。その結果、A β 42およびA β 40のどちらでも分子間 β シート構造を形成している二量体を再現することができた。分子間 β シート構造を持つA β 二量体を計算で再現したのは初めてである。またA β 42の方がA β 40よりも分子内で β ヘアピン構造を形成しやすいことを示した。これまでの我々の計算により β ヘアピン構造を形成すると分子間 β シート構造を形成しやすいことが分かっており、そのためA β 42の方がA β 40よりも凝集が速いと説明できる。この結果は実験結果と一致しており、この現象を理論的に解明したのは本研究が初めてである。
- b) A β ペプチドはCu²⁺やZn²⁺などの金属イオンの存在で、その凝集が促進されることが実験により知られている。計算を用いた検討もいくつかなされているが、あらかじめ実験結果を再現することが分かっているパラメータを用いた検証しか行われていない。また、多くの計算はA β ペプチド1本と金属イオンとの相互作用についての計算しか行われておらず、複数のA β ペプチドの凝集促進に関しては研究されていない。そこで古典分子動力学計算と量子化学計算を用いた、より一般的なモデルを用いて金属イオン存在下でのA β ペプチドの凝集促進について調べている。昨年度はそのための量子・古典混合分子動力学シミュレーションを高速化する手法を開発し、実際にこの系の計算を167倍高速化することに成功した。この手法を用いた結果、金属イオンと結合するアミノ酸残基を特定することができた。今後詳細な解析を行い、金属イオンによるA β ペプチドの凝集促進機構を解明する。
- c) レプリカ交換法を発展させてより効率的なシミュレーション手法であるレプリカ置換法をこれまでに開発してきた。しかしこれまでのレプリカ置換法では体積が変化せず、圧力を制御することができなかった。そこで、我々は昨年度定温定圧アンサンブルにおけるレプリカ置換分子動力学法を開発した。この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。シニョリンは10残基からなるペプチドであり、フォールド状態とミスフォールド状態を持つ。解析の結果、フォールド状態は高圧環境下で構造が壊れるがミスフォールド状態はより安定化することを発見した。ペプチドの2次構造は通常加圧とともに壊れるので、この現象は通常とは異なる特異なものである。さらにこの現象が起きる分子論的機構も解明した。

d) 大規模分子動力学シミュレーションを長時間実行するため、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。これまで MPI および OpenMP によるハイブリッド並列化に取り組み, 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。今年度はタンパク質など全ての原子についても並列化を行った。今後さらに効率化を進め, 大規模・長時間分子動力学シミュレーションに実用する。

B-1) 学術論文

M. YAMAUCHI and H. OKUMURA, “Development of Isothermal-Isobaric Replica-Permutation Method for Molecular Dynamics and Monte Carlo Simulations and Its Application to Reveal Temperature and Pressure Dependence of Folded, Misfolded, and Unfolded States of Chignolin,” *J. Chem. Phys.* **147**, 184107 (15 pages) (2017).

B-4) 招待講演

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の形と動き」, 日本物理学会 2017 年度公開講座「物理で探る生物の謎」, 東京, 2017 年 11 月.

奥村久士, 「コンピューターシミュレーションで見るタンパク質」, 自然科学カフェの集い(第 27 回), 東京, 2017 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線維の形成過程と破壊過程」, 近畿化学協会コンピュータ化学部会例会, 大阪, 2017 年 10 月.

奥村久士, 「各種統計アンサンブルの生成法」, 第 11 回分子シミュレーションスクール——基礎から応用まで——, 岡崎, 2017 年 9 月.

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」, 慶應義塾大学理工学部物理学科談話会, 横浜, 2017 年 6 月.

奥村久士, 「アミロイド線維のシミュレーション——構造サンプリングと非平衡分子動力学——」, 第 11 回革新的量子化学シンポジウム～量子的自然の叡智と美～, 京都, 2017 年 5 月.

奥村久士, 「分子動力学シミュレーションで調べたアミロイド線維の揺らぎと破壊」, 第 2 回計算分子科学の若手研究会, 金沢, 2017 年 3 月.

奥村久士, 「レプリカ置換法の開発とアミロイド線維への応用」, 分子シミュレーションセミナー「pH 一定の分子シミュレーション技術などの発展とその応用」, 横浜, 2017 年 1 月.

伊藤 暁, 「レプリカ置換法とその応用」, ワークショップ「レア・イベントの計算科学」, 熱海, 2017 年 8 月.

伊藤 暁, “Replica-permutation method: efficient sampling for biomolecules,” 分子集合系化学工学セミナー, 豊中, 2017 年 7 月.

伊藤 暁, 「レプリカ置換法とそのアミロイド β ペプチドへの応用」, 研究会「凝集系の理論化学」, 那覇, 2017 年 4 月.

伊藤 暁, 「pH レプリカ交換法とその生体分子への応用」, 分子シミュレーションセミナー「pH 一定の分子シミュレーション技術などの発展とその応用」, 横浜, 2017 年 1 月.

H. OKUMURA, “Amyloid fibril formation by molecular dynamics simulations,” 2017 NCTS December Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Hsinchu (Taiwan), December 2017.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations for aggregation and disaggregation of amyloid- β peptides,” EMN Meeting on Computation and Theory 2017, Dubai (U.A.E.), November 2017.

H. OKUMURA, “Simulational studies of A β amyloid fibrils by equilibrium and nonequilibrium molecular dynamics method,” 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Pathum Thani (Thailand), August 2017.

H. OKUMURA, “Replica-permutation simulation of biomolecules: Application of the Suwa-Todo Monte Carlo algorithm,” Seminar in Bioinformatics Program and Biochemistry Department, Chulalongkorn University, Bangkok (Thailand), August 2017.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations of A β amyloid fibrils in equilibrium and nonequilibrium systems,” 3rd Japan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2017, Yokohama (Japan), July 2017.

H. OKUMURA, “All-atom molecular dynamics simulations of A β amyloid fibrils,” 2017 NCTS Seminars on Critical Phenomena and Complex Systems, Hsinchu (Taiwan), June 2017.

H. OKUMURA, “All-atom molecular dynamics simulations to reveal dynamical ordering of amyloid fibril,” International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2017, Thessaloniki (Greece), April 2017.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations for fluctuation and disruption of amyloid fibril,” 2017 NCTS March Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Hsinchu (Taiwan), March 2017.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations for creation and disruption of amyloid fibrils,” International Symposium on Molecular Science—Physical Chemistry/Theoretical Chemistry, Chemoinformatics, Computational Chemistry, Yokohama (Japan), March 2017.

H. OKUMURA, “All-atom molecular dynamics simulations of A β amyloid fibrils,” Institute for Protein Research (IPR) Seminar, Osaka (Japan), January 2017.

H. OKUMURA, “Equilibrium and nonequilibrium molecular dynamics simulations of A β amyloid fibrils,” 10th International Conference on Computational Physics, Macau (China), January 2017.

S. G. ITOH, “Replica-permutation method to obtain efficient sampling for biomolecules,” The 2017 EMN Meeting on Computation and Theory, Dubai (U.A.E.), November 2017.

S. G. ITOH, “Oligomerization Pathway of Amyloid- β Fragments Studied by the Hamiltonian Replica-Permutation Method,” The 21st International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Pathum Thani (Thailand), August 2017.

S. G. ITOH, “Oligomerization of A β (29-42) using Hamiltonian Replica-Permutation MD simulations,” 2017 NCTS March Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Hsinchu (Taiwan), March 2017.

K. ISHIMURA, “Development of Massively Parallel Quantum Chemistry Calculation Program,” 2017 NCTS March Workshop on Critical Phenomena and Complex Systems, Hsinchu (Taiwan), March 2017.

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).

山内仁喬, 第 44 回生体分子科学討論会優秀ポスター賞 (2017).

山内仁喬, 第 11 回分子科学討論会優秀ポスター賞 (2017).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会名古屋支部役員 (2017-).

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), オブザーバー (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

ポスト「京」重点課題5「エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発」運営委員 (2016-).

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」, 2017年12月14日.

慶應義塾大学理工学部, 「理工学概論」, 2017年6月14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) これまでにA β ペプチド2本の分子動力学シミュレーションを行い、その二量体構造を調べてきた。今後、より多く(5本程度)のA β を含むシミュレーションを行い、オリゴマー構造とその形成過程を調べる。特に二量体形成の際に見られた β ヘアピン構造形成が分子間 β シート構造形成を促進させるという現象が三量体、四量体、五量体形成においても観察されるか、あるいは別の機構でオリゴマーが形成されるのか解明する。二量体形成の際にはまず β ヘアピン構造を形成することでA β の一部分を伸びた構造に安定させることができるが、三量体形成の際にはすでに分子間 β シート構造が形成されているので必ずしも β ヘアピン構造を形成する必要はないようにも思われる。シミュレーションを行うことで二量体形成と三量体以上のオリゴマー形成のメカニズムの類似点、相違点を明らかにする。この研究により、アルツハイマー病の原因と考えられているA β のオリゴマー構造とその形成過程を解明する。
- 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っている。これまでに高速な量子・古典混合分子動力学法を開発し、金属イオンと結合するアミノ酸残基を特定した。今後さらに詳細な解析を行い、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) A β ペプチド以外のタンパク質のアミロイド線維形成過程についても今後調べていく。 α シヌクレインのアミロイド線維はパーキンソン病の原因として知られている。 α シヌクレインのうちアミロイド線維を形成する核となる部分が最近特定されたので、その部分のアミロイド線維形成過程を分子動力学シミュレーションで解明し、A β ペプチドのアミロイド線維の場合と比較検討を行う。

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) 大規模系のための励起状態計算手法の開発
- b) 有機／有機界面の電荷移動状態の解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機フレキシブルデバイスの光電子物性予測を目的として，大規模分子集合体の励起状態計算手法の開発を行った。有機フレキシブルデバイスは，有機半導体分子からなる乱れた分子集合体である。分子間の軌道間相互作用・状態間相互作用により，電子励起状態が複数の分子に非局在化する場合があるため，一般的な非局所励起を計算できる手法が必要である。我々はフラグメント分子軌道（FMO）法に基づいて，非局所励起状態を計算できる励起状態法を開発した。手法の骨子は，励起状態や電荷がフラグメント毎に局在化した configuration state function（CSF）から全系の励起状態を近似することにある。励起状態ハミルトニアン of 行列要素をフラグメント CSF で計算し対角化することにより，全系の励起状態の近似解が得られる。 π 共役分子の 2 量体や分子結晶でベンチマーク計算を行ったところ，フラグメント分割なしの通常の計算の結果を，数十 meV 以下の精度で再現できることがわかった。さらに，励起子モデルをシームレスに導出できることが特徴であるため，量子ダイナミクス法との接合が容易である。
- b) 有機太陽電池系のペンタセン／C₆₀ の有機／有機界面の電荷移動状態の解析を行った。有機／有機界面で形成される電荷移動状態は，電子アクセプター相の電子波動関数と電子ドナー相の正孔波動関数からなる状態である。電荷移動状態は電荷分離・電荷再結合の中間状態に関与することから，有機光デバイス系のエネルギー変換過程において重要な役割を担う。その重要性にも関わらず，実験で電荷移動状態のエネルギーを決める困難さから，電荷移動状態の本質は解明されていない。本研究では FMO 法と Quantum mechanics/molecular mechanics（QM/MM）法を組み合わせて，界面付近のおよそ 50 分子を量子的に扱い，周囲の分子は外部電荷として取り扱った電子状態系計算を行った。FMO 法に基づいた励起状態法を適用したところ，最低準位の電荷移動状態のエネルギーは実験値とよく一致していることが分かった。さらに電子-正孔距離，電子・正孔波動関数の inverse participation ratio，電子-正孔距離の分散，振動子強度といった物理量を導入することにより，電荷移動状態の解析を行った。ペンタセンの局所励起状態と電荷移動状態との混合が，電子-正孔距離の分散・振動子強度を増大させることがわかり，非局在化した電荷移動状態が光吸収により直接励起されることがわかった。

B-1) 学術論文

T. FUJITA, Y. HAKETA, H. MAEDA and T. YAMAMOTO, "Relating Stacking Structures and Charge Transport in Crystal Polymorphs of the Pyrrole-Based π -Conjugated Molecule," *Org. Electron.* **49**, 53–63 (2017).

T. FUJITA and T. YAMAMOTO, "Assessing the Accuracy of Integral Equation Theories for Nano-Sized Hydrophobic Solutes in Water," *J. Chem. Phys.* **147**, 014110 (12 pages) (2017).

S. MOSTAME, J. HUH, C. KREISBECK, A. J. KERMAN, T. FUJITA, A. EISFELD and A. ASPURU-GUZI, “Analog Quantum Simulators May Outperform Classical Algorithms: Emulation of Complex Open Quantum Systems Using Superconducting Qubits,” *Quantum Inf. Process.* **16**, 44 (16 pages) (2017).

B-4) 招待講演

藤田貴敏, 「有機分子集合体の光物性と励起ダイナミクス」, 第1回量子生命科学研究会, 東京大学, 東京(日本), 2017年4月.

藤田貴敏, 「有機分子集合体の励起ダイナミクス」, 神戸大学先端融合科学シンポジウム「非共有結合系の分子科学：構造と機能」, 神戸大学, 神戸(日本), 2017年7月.

T. FUJITA, “Development of Fragment Molecular Orbital Method for Organic Optoelectronic Materials,” Workshop Development of next-generation quantum materials research platform, University of Tokyo, Tokyo (Japan), December 2017.

C) 研究活動の課題と展望

A-2)(b)の研究課題では, 電荷移動状態のエネルギーは再現できたものの, 電荷分離状態のエネルギーは上手く再現できなかった。実験値を再現できなかった原因は, 電荷分離に伴い周囲の有機分子に引き起こされる電子分極の効果が計算に考慮されていないからである。電子分極の効果を考慮するためには, 誘電関数を第一原理的に計算しつつ軌道エネルギーや電子-正孔クーロン力を算出できる手法が必要である。そこで今後はフラグメント分割法に基づいたGW/Bethe-Salpeter方程式法の開発・実装を計画している。局所励起状態・電荷移動状態・電荷分離状態間のエネルギー差を正確に算出できる手法を確立して, 電荷分離や電荷再結合の量子ダイナミクスへと展開していきたい。

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) レア・イベントの新規サンプリング手法の開発と生体分子マシンへの応用
- 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) 生体分子マシンが機能する際の典型的な時間スケールはミリ秒以上で、タンパク質等大規模複合体からなる生体分子マシンのそのような（分子スケールで）レアな構造ダイナミクスを従来の手法でシミュレーションするのは現在の計算機性能では困難である。そこで、レア・イベントの遷移ダイナミクスを集中的にサンプリングする手法である **Transition path sampling** を大規模系でも使えるように効率化したアルゴリズムを開発した。それをトランスポーター系に応用して、その動作メカニズムを解明している。
- 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

H. JUNG, K. OKAZAKI and G. HUMMER, “Transition Path Sampling of Rare Events by Shooting from the Top,” *J. Chem. Phys.* **147**, 152716 (10 pages) (2017).

B-4) 招待講演

岡崎圭一, 「生体分子モーター F₁-ATPase における機能ダイナミクスのシミュレーション」, スーパーコンピュータワークショップ 2016, 岡崎市, 2017年2月.

K. OKAZAKI, “Molecular simulation and modeling of functional dynamics in F₀F₁-ATP synthase,” *Frontiers in Computational Biophysics and Biochemistry*, RIKEN AICS, Kobe (Japan), February 2017.

岡崎圭一, 「生体分子モーターにおける機能ダイナミクスのシミュレーション」, 化学反応のポテンシャル曲面とダイナミクス, 那覇市, 2017年4月.

K. OKAZAKI, “Molecular simulation and modeling of functional dynamics in biomolecular motor ATP synthase,” 2017 Summer Symposium of KCS-Physical Chemistry Division and 2017 Korea-Japan Molecular Science Symposium, Busan (Korea), July 2017.

岡崎圭一, 「F型ATP合成酵素における機能ダイナミクスのモデリングとシミュレーション」, 神戸大学先端融合科学シンポジウム「非共有結合系の分子科学: 構造と機能」, 神戸市, 2017年7月.

岡崎圭一, “Molecular simulation and modeling of functional dynamics in biomolecular motor,” 東京大学物性研究所理論セミナー, 柏市, 2017年8月.

岡崎圭一, 「Transition path sampling における新しい遷移パス生成法による効率化」, レア・イベントの計算科学, 伊豆市, 2017年8月.

岡崎圭一, “Transport mechanism of Na⁺/H⁺ antiporter from transition-path simulations,” 第55回日本生物物理学会年会シンポジウム「いろいろなスケールで働く膜タンパク質の作動原理」, 熊本市, 2017年9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

学会の組織委員等

分子シミュレーションスクール世話人 (2016–2017).

日本生物物理学会分野別専門委員(アロステリズム) (2017).

日本生物物理学会運営委員 (2010–2011).

その他

Netherlands Organisation for Scientific Research (NWO), Innovational Research Incentives Scheme, external reviewer (2017).

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, 「バ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: 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求する研究を進めている。単一の生体分子モーターやトランスポ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・極低温リユードバ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-3) 総説, 著書

大森賢治,「ようこそ量子」, INTERVIEW #015; #017, 国立情報学研究所量子情報国際研究センター, 2017年3月24日(2017).
N. TAKEI, C. SOMMER, C. GENES. G. PUPILLO, H. GOTO, K. KOYASU, H. CHIBA, M. WEIDEMÜLLER and K. OHMORI, “Ultrafast Quantum Simulator,” 2Physics (invited article), <http://www.2physics.com/2017/03/ultrafast-quantum-simulator.html>, March 2017 (2017).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

大森賢治,「量子科学技術の拓く未来社会とは」, JXTG エネルギー株式会社中央技術研究所, 横浜(日本), 2017年7月.

大森賢治,「量子科学技術の国際動向と日本の展望」, 林芳正文部科学大臣主催会合, 京都(日本), 2017年10月.

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” Atomic and Laser Physics Seminar, University of Oxford, Oxford (U.K.), November 2017.*

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” Max Planck Institute for the Science of Light, Erlangen (Germany), October 2017.

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” CUA Seminar Series, MIT-Harvard Center for Ultracold Atoms, Cambridge (U.S.A.), September 2017.*

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” Gordon Research Conference on “Quantum Control of Light and Matter,” Mount Holyoke College, South Hadley (U.S.A.), August 2017.*

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” Institut d’Optique, Palaiseau (France), May 2017.

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” Les Houches/Telluride Workshop on “Quantum Dynamics and Spectroscopy of Functional Molecular Materials and Biological Photosystems,” Les Houches (France), May 2017.*

K. OHMORI, “Ultrafast Many-Body Electron Dynamics in a Strongly Correlated Ultracold Rydberg Gas,” IQOQI, University of Innsbruck (Austria), May 2017.

大森賢治,「量子科学技術の拓く未来社会とは」, JXTG エネルギー株式会社・中央技術研究所, 横浜(日本), 2017年7月.

武井宣幸,「強相関リユードバリ原子を用いた超高速量子シミュレーター」, 第14回原子・分子・光科学(AMO)討論会, 電気通信大学, 調布(日本), 2017年6月.

N. TAKEI, "Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly-correlated ultracold Rydberg gas," BIT's 1st Annual Conference of Quantum World-2017, Changsha (China), October 2017.

B-6) 受賞, 表彰

大森賢治, 松尾財団宅間宏記念学術賞 (2017).
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

14th 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).
Gordon Research Conference on Quantum Control of Light and Matter 2019 副議長, 2021 議長 (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・学術審議会量子科学技術委員会専門委員(主査代理)(2015-).

文部科学省科学技術・学術審議会量子科学技術委員会・量子情報処理(主に量子シミュレーション)に係るロードマップ
検討グループメンバー(2017-).

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.

QuantERA (<https://www.quantera.eu>), Invited Remote Reviewer (2017-).

EU Future and Emerging Technologies, HORIZON 2020, European Commission, Scientific and Industrial Advisory Board
(SIAB) (2017-).

学会誌編集委員

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, IOP, International Advisory Board (2015-2017).

その他

文部科学省からの依頼で, 林芳正文部科学大臣と欧州連合(EU)Carlos Moedas 欧州委員(研究・科学・イノベーション
担当)との間の「量子技術分野の今後の協力に関する合意」(2018年1月8日, ブリュッセル)に貢献。

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(フンボルト賞受賞者), 2012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)。

B-11) 産学連携

浜松ホトニクス(株), 共同研究(科研費・特別推進研究を共同推進), 大森賢治(2017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局所分子間相互作用の研究：本グループでは内殻励起・光電子スペクトルのエネルギーシフト（化学シフト）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変化を明らかにできることを示してきた。特に最近では、 μ スケールの空間分解能を有するその場観測用軟X線吸収試料セルを開発することによって、研究対象を拡大している。また、集光素子を使ったナノスケール化学状態マッピングの開拓的研究にも取り組んでいる。具体的には、濃度や温度に依存した溶液（二成分液体）の溶質の周りの局所的な配位構造の相転移的現象など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

H. YAMANE and N. KOSUGI, “High Hole-Mobility Molecular Layer Made from Strong Electron Acceptor Molecules with Metal Adatoms,” *J. Phys. Chem. Lett.* **8**, 5366–5371 (2017).

M. NAGASAKA, H. YUZAWA and N. KOSUGI, “Interaction between Water and Alkali Metal Ions and Its Temperature Dependence Revealed by Oxygen K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. B* **121**, 10957–10964 (2017).

T. GEJO, M. OURA, T. TOKUSHIMA, Y. HORIKAWA, H. ARAI, S. SHIN, V. KIMBERG and N. KOSUGI, “Resonant Inelastic X-Ray Scattering and Photoemission Measurement of O₂: Direct Evidence for Dependence of Rydberg-Valence Mixing on Vibrational States in O 1s→Rydberg States,” *J. Chem. Phys.* **147**, 044310 (7 pages) (2017).

T. PETIT, L. PUSKAR, T. DOLENKO, S. CHOUDHURY, E. RITTER, S. BURIKOV, K. LAPINSKIY, Q. BRUSTOWSKI, U. SCHADE, H. YUZAWA, M. NAGASAKA, N. KOSUGI, M. KURZYP, A. VENEROSY, H. GIRARD, J.-C. ARNAULT, E. OSAWA, N. NUNN, O. SHENDEROVA and E. F. AZIZ, “Unusual Water Hydrogen Bond Network around Hydrogenated Nanodiamonds,” *J. Phys. Chem. C* **121**, 5185–5194 (2017).

M. YOSHIDA, S. ONISHI, Y. MITSUTOMI, F. YAMAMOTO, M. NAGASAKA, H. YUZAWA, N. KOSUGI and H. KONDOH, “Integration of Active Nickel Oxide Clusters by Amino Acids for Water Oxidation,” *J. Phys. Chem. C* **121**, 255–260 (2017).

T. OHIGASHI, M. NAGASAKA, T. HORIGOME, N. KOSUGI, S. M. ROSENDAHL and A. P. HITCHCOCK, “Development of In-Situ Sample Cells for Scanning Transmission X-Ray Microscopy,” *AIP Conf. Proc.* **1741**, 050002 (4 pages) (2016).

B-3) 総説, 著書

M. NAGASAKA, T. OHIGASHI and N. KOSUGI, “Development of In-Situ/Operando Sample Cells for Soft X-Ray Transmission Spectromicroscopy at UVSOR-III Synchrotron,” *Synchrotron Rad. News* **30**, 3–7 (2017).

長坂将成, 「軟X線吸収分光法による液体の局所構造解析」, *化学と工業* **70(9)**, 828–829 (2017).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, “Liquid and liquid–liquid interface studied by soft X-ray absorption in transmission mode,” International Workshop on Liquid X-Ray Spectroscopy, LiXS2017, SOLEIL, Saint-Aubin (France), January 2017.

N. KOSUGI, “Molecular inner-shell spectroscopy from isolated to interacting systems and its application to *in situ/operando*,” Nano and Molecular Systems (NANOMO) Research Seminar, Oulu (Finland), August 2017.

長坂将成, 「軟X線吸収分光法による液体と液液界面の局所電子状態の解明」, 日本化学会第97春季年会(2017)「若い世代の特別講演会」慶應義塾大学日吉キャンパス, 横浜, 2017年3月.

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).

長坂将成, 分子科学会奨励賞 (2017).

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

日本放射光学会会長 (2017–2019), 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, 先端的リング型光源計画 2005–2007, 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 (2016–2017).

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).
- ICISS 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).
- ICISS-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).
- ICISS-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 (2016–2018).
- 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, 2017), 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 (2015–2018).
- 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 AOFSTR 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放射光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).
- 科研費基盤研究(B), 「軟X線内殻励起の化学シフトの顕微観測と化学的環境解析」, 小杉信博 (2017年–2019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).
- 科研費基盤研究(C), 「弱い相互作用空間における分子性薄膜の構造-電子状態相関の系統的解明」, 山根宏之 (2017年–2019年).
- 科研費新学術領域研究(研究領域提案型)「 π 造形科学:電子と構造のダイナミクス制御による新機能創出」(公募研究), 「有機界面設計に基づく新奇 π 機能の創成と制御」, 山根宏之 (2017年–2018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

本研究グループでは、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、クラスター、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。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、ルブレ単結晶に対して電子フォノン相互作用の検出に世界で初めて成功した。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、バンドギャップに生じる 10ppm レベルの状態密度検出に成功した。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。新たに放射光を利用した波数分解光電子放射顕微測定を実施するとともに、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

F. BUSSOLOTTI, J. YANG, T. YAMAGUCHI, Y. NAKAYAMA, M. MATSUNAMI, H. ISHII, N. UENO and S. KERA, “Hole-Phonon Coupling Effect on the Electronic Band Dispersion of Organic Molecular Semiconductor,” *Nat. Commun.* **8**, 173 (7 pages) (2017).

A. F.-CANELLAS, Q. WANG, K. BROCH, D. A. DUNCAN, P. KUMAR THAKUR, L. LIU, S. KERA, A. GERLACH, S. DUHM and F. SCHREIBER, “Metal-Organic Interface Functionalization via Acceptor End Groups: PTCDI on Coinage Metals,” *Phys. Rev. Mater. (Rapid)* **1**, 013001 (6 pages) (2017).

Q. WANG, Q. XIN, R.-B. WANG, M. OEHZELT, N. UENO, S. KERA and S. DUHM, “Picene Thin Films on Metal Surfaces: Impact of Molecular Shape on Interfacial Coupling,” *Phys. Status Solidi RRL* **11**(5), 1700012 (5 pages) (2017).

J. P. YANG, L.-T. SHANG, F. BUSSOLOTTI, L.-W. CHENG, W.-Q. WANG, X.-H. ZENG, S. KERA, Y.-Q. LI, J.-X. TANG and N. UENO, “Fermi-Level Pinning Appears upon Weak Electrode-Organic Contact without Gap States: A Universal Phenomenon,” *Org. Electron.* **48**, 172–178 (2017).

T. HOSOKAI, K. YONEZAWA, J. P. YANG, K. R. KOSWATTAGE and S. KERA, “Significant Reduction in the Hole-Injection Barrier by the Charge-Transfer State Formation: Diindenoperylene Contacted with Silver and Copper Electrodes,” *Org. Electron.* **49**, 39–44 (2017).

B. REISZ, S. WEIMER, R. BANERJEE, C. ZEISER, C. LORCH, G. DUVA, J. DIETERLE, K. YONEZAWA, J. P. YANG, S. KERA, N. UENO, A. HINDERHOFER, A. GERLACH and F. SCHREIBER, “Structural, Optical, and Electronic Characterization of Perfluorinated Sexithiophene Films and Mixed Films with Sexithiophene,” *J. Mater. Res.* **32**, 1908–1920 (2017).

A. YANG, A. CANELLAS, M. SATO, B. WANG, R.-B. WANG, H. KOIKE, I. SALZMANN, P. K. THAKUR, T.-L. LEE, L.-J. LIU, S. KERA, A. GERLACH, K. KANAI, J. FAN, F. SCHREIBER and S. DUHM, “Nitrogen Substitution Impacts Organic-Metal Interface Energetics,” *Phys. Rev. B* **94**, 155426 (9 pages) (2016).

B-3) 総説, 著書

J. P. YANG, F. BUSSOLOTTI, S. KERA and N. UENO, “Origin and Role of Gap States in Organic Semiconductor: As the Nature of Organic Molecular Crystals,” *J. Phys. D: Appl. Phys. (Topical Review)* **50**, 423002 (45 pages) (2017).

B-4) 招待講演

S. KERA, "Tracking a transport charge in organic semiconductor material," The 9th International Conference of Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces (ESPMI-9), NUS, Singapore, November 2017.

S. KERA, "Tracking charge transport of organic semiconductor material by electronic structure measurement," International Conference of Nano and Giga Challenges in Electronics, Photonics and Renewable Energy, Tomsk (Russia), September 2017.

S. KERA, "Spectroscopic evidence on quasiparticle state of organic semiconductor materials," 2017 Korea-Japan Molecular Science Symposium—Frontiers in Molecular Science: Structure, Dynamics, and Function of Molecules and Complexes—, Busan (Korea) July 2017.

S. KERA, "Tracking charge transport in rubrene single crystal," Workshop on Organic Semiconductors: Charge transport, Doping and Electronic states, Chiba (Japan), January 2017.

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

The 9th International Conference of Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces, Advisory Panel (Singapore 2017).

The 16th Japan-Korea Molecular Science Symposium, Co-Chair (Busan, Korea 2017).

第31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 (2017).

第78回応用物理学会秋季学術講演会プログラム編成委員 (2017).

第64回応用物理学会春季学術講演会プログラム編成委員 (2017).

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), 「バ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DEM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を用いた実験を開始している。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。同時にUVSOR 放射光施設のビームタイムの申請に努め、一個人ユーザーとして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実施すると共に、国内の当該コミュニティの基盤強化を推進するためのユーザー支援に注力している。XSW 法、飛行時間型角度分解光電子分光、高運動量分解・エネルギー分解光電子顕微鏡(*k*-PEEM)など、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、欧米からの遅れを取り戻すべく、*k*-PEEM 法をベースとし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。関連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ことが不可欠である。

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：ビーム物理学，加速器科学，放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) シンクロトロン光源の研究
- b) 自由電子レーザーの研究
- c) 相対論的電子ビームからの電磁放射の研究
- 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。電子ビーム光学系の最適化による電子ビーム輝度の大幅な向上，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。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・真空紫外領域での物質系と光渦の相互作用に関する基礎研究を進めている。
- 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継続している。パルス幅数ピコ秒以下の超短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。

B-1) 学術論文

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, T. KONOMI, M. KATOH, H. IWAYAMA and E. SHIGEMASA,
“Limitations in Photoionization of Helium by an Extreme Ultraviolet Optical Vortex,” *Phys. Rev. A* **95**, 023413 (7 pages)
(2017).

M. KATOH, M. FUJIMOTO, H. KAWAGUCHI, K. TSUCHIYA, K. OHMI, T. KANEYASU, Y. TAIRA, M. HOSAKA, A. MOCHIIHASHI and Y. TAKASHIMA, “Angular Momentum of Twisted Radiation from an Electron in Spiral Motion,” *Phys. Rev. Lett.* **118**, 094801 (5 pages) (2017).

Y. TAIRA, T. HAYAKAWA and M. KATOH, “Gamma-Ray Vortices from Nonlinear Inverse Thomson Scattering of Circularly Polarized Light,” *Sci. Rep.* **7**, 5018 (9 pages) (2017).

M. KATOH, M. FUJIMOTO, N. S. MIRIAN, T. KONOMI, Y. TAIRA, T. KANEYASU, M. HOSAKA, N. YAMAMOTO, A. MOCHIIHASHI, Y. TAKASHIMA, K. KURODA, A. MIYAMOTO, K. MIYAMOTO and S. SASAKI, “Helical Phase Structure of Radiation from an Electron in Circular Motion,” *Sci. Rep.* **7**, 6130 (8 pages) (2017).

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA, M. HOSAKA, E. SHIGEMASA and M. KATOH, “Observation of an Optical Vortex Beam from a Helical Undulator in the XUV Region,” *J. Synchrotron Radiat.* **24**, 934–938 (2017).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

N. YAMAMOTO, T. MIYAUCHI, A. MANO, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA and M. KATOH, “Electron Beam Generation From InGaN/GaN Superlattice Photocathode,” *Proc. 8th Internat. Particle Accel. Conf.*, 522–524 (2017).

A. MOCHIIHASHI, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, A. MANO, T. ISHIDA, H. OHKUMA, S. SASAKI, Y. HORI, S. KODA and M. KATOH, “Present Status of Accelerators in Aichi Synchrotron Radiation Center,” *Proc. 8th Internat. Particle Accel. Conf.*, 2691–2693 (2017).

B-3) 総説, 著書

全 炳俊, 清 紀弘, 入澤明典, 加藤政博, 「電子加速器によるテラヘルツ波の発生」, *化学工業* **68(3)**, 12–17 (2017).

加藤政博, 「自由電子からの渦電磁波の放射」, *加速器* **14(3)**, 104–112 (2017).

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, 2014–2017).

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).

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 (2015–2016).

日本学術振興会審査・評価部会委員 (2017).

高エネルギー加速器研究機構 ERL 計画推進委員会委員 (2009–).

高エネルギー加速器研究機構 ERL 計画評価専門委員会委員長 (2017).

高エネルギー加速器研究機構 Photon Factory Machine Advisory Committee 委員 (2017).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2001–2002).

B-8) 大学での講義, 客員

奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科, 「物質科学特論 III」, 2017年10月25日.

名古屋大学シンクロtron光研究センター, 客員教授, 2017年4月–.

高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設, 客員教授, 2017年4月–.

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tron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).

科研費基盤研究(A), 「渦放射光発生技術の高度化と利用への展開」, 加藤政博 (2017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tron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を目指し、パルス六極磁石による高度な入射方式の開発やビーム不安定性抑制法の開発を名古屋大学と協力し進めている。

自由電子レーザー及び外部レーザーを用いたコンプトン散乱ガンマ線の発生とその利用法の開拓に、名古屋大学、京都大学、量子技術研究開発機構、山形大学などと協力し取り組んでいる。特に来年度は自由電子レーザー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、核共鳴蛍光イメージング法の開発、光子光子相互作用に関する基礎物理学実験、陽電子消滅法による材料評価技術開発に注力する。

放射光による光渦の生成については、広島大学、名古屋大学などと協力し、その光学的特性の詳細評価、さらに放射光光渦同士との合成によるベクトルビーム発生の研究を世界に先駆けて進める。また、深紫外・真空紫外域の光渦ビームを用いた光渦と物質系の相互作用に関する実験研究を九州シンクロtron光センター、富山大学などと協力し進める。

スピン偏極電子源の開発に、名古屋大学、広島大学、高エネルギー加速器研究機構などと協力し、継続して取り組み、生体物質への照射効果の研究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 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$ (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。これは単位胞中に3つある CuO_2 面間の電子のホッピング移動による **triple-layer splitting** と考えられる。また観測される3つのエネルギーバンドが，それぞれ異なる超伝導ギャップの大きさを示していることも明らかになり，外側の2枚の CuO_2 面が超伝導転移温度に重要であることが示唆される結果となった。またUVSOR BL5Uにおいて，一軸圧を印可した状態での鉄系高温超伝導体 $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ の角度分解光電子分光測定を行い，近年新しく報告され注目を集めている C_4 相の温度領域においてのみ，電子状態が4回対称性を示すことを直接観測することに成功した。
- b) 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たBL5U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。新しい機能として，これまでになかったイメージスピン検出器を開発中である。昨年までにスピン分解検出をする二つのターゲット位置まで電子を導くことに成功していたが，電子軌道が対称的でないことが判明し，新しい電子レンズの開発とパラメーター調整を行っている。同時にターゲット材質の開発も行っており，高効率スピン分解角度分解光電子分光測定の実現を目指している。
- 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，これまで試料部において4.6 K，参照用金部で4 Kという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の低温を実現していたが，さらに冷却部の材質の見直しや液体ヘリウムの排気系を見直すことで，試料部において3.8 K，参照用金部で3.2 Kを達成した。また現在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。そこで今回BL5Uで得たノウハウを応用し，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。2018年度初めにビームラインへ導入することを計画している。

B-1) 学術論文

M. MATSUNAMI, M. OURA, K. TAMASAKU, T. ISHUKAWA, S. IDETA, K. TANAKA, T. TAKEUCHI, T. YAMADA, A. P. TSAI, K. IMURA, K. DEGUCHI, N. K. SATO and T. ISHIMASA, "Direct Observation of Heterogeneous Valence State in Yb-Based Quasicrystalline Approximants," *Phys. Rev. B* **96**, 241102(R) (4 pages) (2017).

T. ITO, D. PINEK, T. FUJITA, M. NAKATAKE, S. IDETA, K. TANAKA and T. OIUSSE, “Electronic Structure of Cr_2AlC as Observed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy,” *Phys. Rev. B* **96**, 195168 (9 pages) (2017).

J. KISHI, Y. OHTSUBO, T. NAKAMURA, K. YAJI, A. HARASAWA, F. KOMORI, S. SHIN, JE. RAULT, P. LE. FEVRE, F. BERTRAN, A. TALEB-IBRAHIM, M. NURMAMAT, H. YAMANE, S. IDETA, K. TANAKA and S. KIMURA, “Spin-Polarized Quasi-One-Dimensional State with Finite Band Gap on the Bi/InSb (001) Surface,” *Phys. Rev. Mater.* **1**, 064602 (5 pages) (2017).

T. HIRAHARA, S. V. EREMEEV, T. SHIRASAWA, Y. OKUYAMA, T. KUBO, R. NAKANISHI, R. AKIYAMA, A. TAKAYAMA, T. HAJIRI, S. IDETA, M. MATSUNAMI, K. SUMIDA, K. MIYAMOTO, Y. TAKAGI, K. TANAKA, T. OKUDA, T. YOKOYAMA, S. KIMURA, S. HASEGAWA and E. V. CHULKOV, “A Large-Gap Magnetic Topological Heterostructure Formed by Subsurface Incorporation of a Ferromagnetic Layer,” *Nano Lett.* **17**, 3493–3500 (2017).

J. MIAO, X. H. NIU, D. F. XU, Q. YAO, Q. Y. CHEN, T. P. YING, S. Y. LI, Y. F. FANG, J. C. ZHANG, S. IDETA, K. TANAKA, B. P. XIE, D. L. FENG and F. CHEN, “Electronic Structure of FeS,” *Phys. Rev. B* **95**, 205127 (6 pages) (2017).

Y. OKUYAMA, Y. SUGIYAMA, S. IDETA, K. TANAKA and T. HIRAHARA, “Growth and Atomic Structure of Tellurium Thin Films Grown on Bi_2Te_3 ,” *Appl. Surf. Sci.* **398**, 125–129 (2017).

L. LIU, K. OKAZAKI, T. YOSHIDA, H. SIZUKI, M. HORIO, L. C. C. AMBOLODE II, J. XU, S. IDETA, M. HASHIMOTO, D. H. LU, Z.-X. SHEN, Y. OTA, S. SHIN, M. NAKAJIMA, S. ISHIDA, K. KIHOU, C. H. LEE, A. IYO, H. EISAKI, T. MIKAMI, T. KAKESHITA, Y. YAMAKAWA, H. KOMTANI, S. UCHIDA and A. FUJIMORI, “Unusual Nodal Behaviors of the Superconducting Gap in the Iron-Based Superconductor $\text{Ba}(\text{Fe}_{0.65}\text{Ru}_{0.35})_2\text{As}_2$: Effects of Spin–Orbit Coupling,” *Phys. Rev. B* **95**, 104504 (5 pages) (2017).

Y. NAKAYAMA, Y. MIZUNO, M. HIKASA, M. YAMAMOTO, M. MATSUNAMI, S. IDETA, K. TANAKA, H. ISHII and N. UENO, “Single-Crystal Pentacene Valence-Band Dispersion and Its Temperature Dependence,” *J. Phys. Chem. Lett.* **8**, 1259–1264 (2017).

F. BUSSOLOTTI, J. YANG, T. YAMAGUCHI, K. YONEZAWA, K. SATO, M. MATSUNAMI, K. TANAKA, Y. NAKAYAMA, H. ISHII, N. UENO and S. KERA, “Hole–Phonon Coupling Effect on the Band Dispersion of Organic Molecular Semiconductors,” *Nat. Commun.* **8**, 173 (7 pages) (2017).

B-4) 招待講演

田中清尚, 「UVSOR BL5UにおけるARPESと今後の展望」, PF研究会「次世代光源で拓かれる光電子分光研究の将来展望」, KEK つくばキャンパス, つくば, 2017年10月.

K. TANAKA, “Observation of triple-layer splitting in high- T_c cuprate $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$ observed by ARPES at UVSOR,” Incheon national university, Incheon (Korea), November 2017.

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ユーザー利用を開始した。現在, 高分解能を利用した角度分解光電子分光実験を行っており, 成果が出始めている。今後は新しい高効率スピン分解測定手法の開発も同時に進めていきたい。

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～2017年9月30日）*¹）

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、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。真空紫外領域に於いて、二台のアンジュレータから放射された光ビーム同士の干渉を観測する実験を行い、理論計算とよく一致する結果が得られた。引き続き、光渦と原子の相互作用を直接観測する手法の開発を進めている。
- 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。一昨年度から運用を開始した SACLA の BL1 において、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。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。メチル基を含む小さな分子に関して、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状態が、高効率な結合組み換え反応を引き起こし、 H_3^+ イオンをサイト選択的に生成することが明らかになった。

B-1) 学術論文

J. R. HARRIES, C. OHAE, S. KUMA, K. NAKAJIMA, T. TOGASHI, Y. MIYAMOTO, N. SASAO, H. IWAYAMA, M. NAGASONO, M. YABASHI and E. SHIGEMASA, “Single-Atom Response of Helium Atoms to Pulses from an EUV Free Electron Laser: Implications for the Subsequent Development of Superfluorescence,” *Phys. Rev. A* **94**, 063416 (9 pages) (2016).

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, T. KONOMI, M. KATOH, H. IWAYAMA and E. SHIGEMASA, “Limitations in Photoionization of Helium by an Extreme Ultraviolet Optical Vortex,” *Phys. Rev. A* **95**, 023413 (7 pages) (2017).

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, M. FUJIMOTO, H. IWAYAMA, M. HOSAKA, E. SHIGEMASA and M. KATOH, “Observation of an Optical Vortex Beam from a Helical Undulator in the XUV Region,” *J. Synchrotron Radiat.* **24**, 934–938 (2017).

H. IWAYAMA, C. LÉONARD, F. LE QUÉRÉ, S. CARNIATO, R. GUILLEMIN, M. SIMON, M. N. PIANCASTELLI and E. SHIGEMASA, “Different Time Scales in the Dissociation Dynamics of Core-Excited CF₄ by Two Internal Clocks,” *Phys. Rev. Lett.* **119**, 203203 (5 pages) (2017).

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, 2015–2017).

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 AOFSSR (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).

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).

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 (2001–2017).

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)

B-8) 大学での講義, 客員

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–2017年3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

繁政の退職に伴い, 専用ビームラインBL6Uでの原子分子関係の協力研究や国際共同研究は実施が不可能となった。グループが所有する実験装置については, 引き続き利用可能なので, 共同研究者の方々には, 軟X線が供給可能な施設ビームラインにおいて実験研究を継続していただければ幸いである。アンジュレータやFELを利用することが前提となる難易度の高い実験研究については, 他施設を利用しながら継続することになる。

*) 2017年9月30日退職

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等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。2017年は、特に、世界初の完全大気圧（1気圧）下での光電子分光測定に成功した。
- 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・幾何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、サブナノ～サブピコ秒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、磁性合金等の硬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

L. YU, Y. TAKAGI, T. NAKAMURA, O. SEKIZAWA, T. SAKATA, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA, G. SAMJESKÉ and T. YOKOYAMA, “Non-Contact Electric Potential Measurements of Electrode Components in Operating Polymer Electrolyte Fuel Cell by Near Ambient Pressure XPS,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 30798–30803 (2017). DOI: 10.1039/c7cp05436j

A. KOIDE and T. YOKOYAMA, “Effects of the Spin–Orbit Interaction in Chromium on the Oxygen K-Edge X-Ray Magnetic Circular Dichroism Spectra in CrO₂,” *Phys. Rev. B* **96**, 144419 (9 pages) (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.96.144419

Y. TAKAHASHI, T. MIYAMACHI, S. NAKASHIMA, N. KAWAMURA, Y. TAKAGI, M. UOZUMI, V. ANTONOV, T. YOKOYAMA, A. ERNST and F. KOMORI, “Thickness-Dependent Electronic and Magnetic Properties of γ' -Fe₄N Atomic Layers on Cu(001),” *Phys. Rev. B* **95**, 224417 (8 pages) (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.95.224417

Y. UEMURA, D. KIDO, A. KOIDE, Y. WAKISAKA, Y. NIWA, S. NOZAWA, K. ICHIYANAGI, R. FUKAYA, S. ADACHI, T. KATAYAMA, T. TOGASHI, S. OWADA, M. YABASHI, K. HATADA, A. IWASE, A. KUDO, S. TAKAKUSAGI, T. YOKOYAMA and K. ASAKURA, “Capturing Local Structure Modulations of Photoexcited BiVO₄ by Ultrafast Transient XAFS,” *Chem. Commun.* **53**, 7314–7317 (2017). DOI: 10.1039/c7cc02201h

Y. TAKAGI, T. NAKAMURA, L. YU, S. CHAVEANGHONG, O. SEKIZAWA, T. SAKATA, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA, “X-Ray Photoelectron Spectroscopy under Real Ambient Pressure Conditions,” *Appl. Phys. Express* **10**, 076603 (4 pages) (2017). DOI: 10.7567/APEX.10.076603

T. HIRAHARA, S. V. EREMEEV, T. SHIRASAWA, Y. OKUYAMA, T. KUBO, R. NAKANISHI, R. AKIYAMA, A. TAKAYAMA, T. HAJIRI, S. IDETA, M. MATSUNAMI, K. SUMIDA, K. MIYAMOTO, Y. TAKAGI, K. TANAKA, T. OKUDA, T. YOKOYAMA, S. KIMURA, S. HASEGAWA and E. V. CHULKOV, “A Large-Gap Magnetic Topological Heterostructure Formed by Subsurface Incorporation of a Ferromagnetic Layer,” *Nano Lett.* **17**, 3493–3500 (2017). DOI: 10.1021/acs.nanolett.7b00560

S. YOSHIKAWA, E. MINAMITANI, S. VIJAYARAGHAVAN, P. MISHRA, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, H. OBA, J. NITTA, K. SAKAMOTO, S. WATANABE, T. NAKAYAMA and T. UCHIHASHI, “Controlled Modification of Superconductivity in Epitaxial Atomic Layer-Organic Molecule,” *Nano Lett.* **17**, 2287–2293 (2017). DOI: 10.1021/acs.nanolett.6b05010

Y. TAKAGI, H. WANG, Y. UEMURA, T. NAKAMURA, L. -W. YU, O. SEKIZAWA, T. URUGA, M. TADA, G. SAMJESKÉ, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA, “In Situ Study of Oxidation States of Platinum Nanoparticles on a Polymer Electrolyte Fuel Cell Electrode by Near Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 6013–6021 (2017). DOI: 10.1039/c6cp06634h

Q. YUAN, S. TAKAKUSAGI, Y. WAKISAKA, Y. UEMURA, T. WADA, H. ARIGA and K. ASAKURA, “Polarization-Dependent Total Reflection Fluorescence X-Ray Absorption Fine Structure (PTRF-XAFS) Studies on the Structure of a Pt Monolayer on Au (111) Prepared by the Surface-Limited Redox Replacement Reaction,” *Chem. Lett.* **46**, 1250–1253 (2017). DOI: 10.1246/cl.170423

B-3) 総説、著書

横山利彦, 「XAFS の理論」, 「XAFS の基礎と応用」, 日本XAFS 研究会(太田俊明・朝倉清高・阿部 仁・稲田康宏・横山利彦)編, 講談社, 2章 1,4,5節, pp. 9–22, 56–69 (2017).

B-4) 招待講演

横山利彦, 「XAFS の発展と将来展望」, 日本XAFS 研究会夏の学校, 高島, 滋賀, 2017年 8月.

横山利彦, 「磁気円二色性の30年」, 日本物理学会 2017年秋季大会企画シンポジウム, 盛岡, 2017年 9月.

横山利彦, 「X線分光の現状と展望」, 日本金属学会東北支部第16回研究発表大会, 仙台, 2017年 11月.

高木康多, 「雰囲気制御型硬X線光電子分光による固体高分子形燃料電池電極触媒の in situ 測定」, 第1回表界面計測技術研究会——電子と光子をプローブとした表界面計測——, 葉山, 神奈川, 2017年 2月.

高木康多, 「大気圧下で動作する光電子分光測定装置の開発」, PF 研究会「次世代光源で拓かれる光電子分光研究の将来展望」, つくば, 茨城, 2017年 10月.

Y. TAKAGI, “In-Situ Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopic Study of Electrodes of Polymer Electrolyte Fuel Cells,” International Symposium on Novel Energy Nanomaterials, Catalysts and Surfaces for Future Earth, The University of Electro-Communications, Tokyo (Japan), October 2017.

Y. UEMURA, “Structural dynamics of photocatalysts observed by ultrafast time resolved XAFS,” EMN Meeting On Ultrafast, Radisson Resort Orlando-Celebration, Orlando (U.S.A.), October 2017.

上村洋平, 「超高速時間分解 XAFS による不均一触媒のメカニズム」, 第9回日本放射光学会若手研究会, 東京, 2017年9月.

Y. UEMURA, “Femtoseconds transient XAFS,” XTRAM2017, the Ettore Majorana Foundation, Erice (Italy), July 2017.

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).

上村洋平, 第21回日本放射光学会奨励賞 (2017).

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, 2018–2019).

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).

日本 XAFS 研究会庶務幹事 (2018–). (上村洋平)

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 (1998–2017).

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

文部科学省科学技術・学術審議会基礎基盤研究部会研究基盤整備・高度化委員 (2017–).

文部科学省元素戦略と大型研究施設の連携に関するシンポジウム企画委員 (2017–).

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, 2015–2016).

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–).

名古屋工業大学人事部会外部委員 (2015).

広島大学放射光科学研究センター外部評価委員 (2017).

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 (2012–2021).

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実施機関」実施責任者 (2012–2021).

文部科学省ナノテクノロジー・ネットワーク「中部地区ナノテク総合支援」拠点長 (2007–2011).

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

名古屋大学大学院理学研究科, 客員教授, 2012年–.

名古屋工業大学, 博士論文審査委員, 2017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・ナノドットの磁気的性質、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目指し、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)、磁気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げられている。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改良により大気圧 100,000 Pa での光電子分光観測に世界で初めて成功した。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、これらの観測でも成果が挙げられた。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。2017年は可視光応答触媒BiVO₄のBi周辺励起電子状態・幾何構造解析に成果があった。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。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できた。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~μsの変化が対象)の構築を進めている。

2017年11月に高木康多助教が転出し、現在新たな助教を公募中であり、次年度以降の新たな研究課題を視野に入れている。

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・電荷ダイナミッ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, 新規な自己ドープ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ダ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

M. ASADA and T. NAKAMURA, “Magnetic Resonance Investigation for Possible Antiferromagnetic Subphase in (TMTTF)₂Br,” *Phys. Rev. B* **96**, 125120 (6 pages) (2017).

E. JIN, M. ASADA, Q. XU, S. DALAPATI, M. A. ADDICOAT, M. A. BRADY, H. XU, T. NAKAMURA, T. HEINE, Q. CHEN and D. JIANG, “Two-Dimensional sp² Carbon-Conjugated Covalent Organic Frameworks,” *Science* **357**, 673–676 (2017).

S. KITOU, T. FUJII, T. KAWAMOTO, N. KATAYAMA, S. MAKI, E. NISHIBORI, K. SUGIMOTO, M. TAKATA, T. NAKAMURA and H. SAWA, “Successive Dimensional Transition in (TMTTF)₂PF₆ Revealed by Synchrotron X-Ray Diffraction,” *Phys. Rev. Lett.* **119**, 065701 (5 pages) (2017).

B-4) 招待講演

T. NAKAMURA, “Investigation of Paramagnetic Condensed Materials and Functional Biological System,” The 5th Awaji International Workshop on Electron Spin Science & Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications (AWEST2017), Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji (Japan), June 2017.

B-6) 受賞, 表彰

中村敏和, 日本物理学会第 22 回論文賞 (2017).

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 (2016–2017).

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 (2014).

The 22nd Meeting of the International Society of Magnetic Resonance (ISMAR 2021), Osaka, Japan, Executive Committee, 実行委員 (2017–).

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-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,「機能物性科学」,2017年 5月 9日–6月 20日.

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).

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) ショックレー・クエーサー限界に達する開放端電圧を示す有機太陽電池
- b) 有機太陽電池のキャリア飛程のインピーダンス分光による決定

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 超高速キャリア移動度有機半導体による有機太陽電池が，太陽電池の理論限界値（ショックレー・クエーサー（SQ）限界）に達する開放端電圧を示すことを見出した。これまでの有機太陽電池の開放端電圧は，すべて SQ 限界より 0.5 V 以上小さく，これは分子振動にエネルギーが散逸する無輻射再結合によるロスである。今回の有機半導体は長鎖アルキルを有し，ファスナー効果によって分子振動が抑制されて高速移動度を示す。そのため，分子振動による無輻射再結合も抑制されていると考えている。これは，有機太陽電池の開放端電圧を増大させる指針となる成果である。
- b) 有機太陽電池の光キャリア発生層である，フラレーン（C₆₀）とフタロシアニン（H₂Pc）の共蒸着膜のキャリア移動度，寿命，飛程を，ホールオンリー，電子オンリーデバイスを用いてインピーダンス分光で評価した。飛程は両者の混合比に対して一定で，キャリアがトラップへの捕獲と脱出を繰り返しながら移動する Multiple Trapping Model で説明できた。また，ホールと電子の飛程は，0.34，9.4 μm で，典型的な有機太陽電池の膜厚約 0.1 μm よりもはるかに長く，再結合が無い条件下では各電極まで十分にキャリアを取り出せることが分かった。逆に言えば，有機太陽電池の性能向上にはキャリア再結合の抑止が不可欠である。

B-1) 学術論文

M. KIKUCHI, K. TAKAGI, H. NAITO and M. HIRAMOTO, “Single Crystal Organic Photovoltaic Cells Using Lateral Electron Transport,” *Org. Electron.* **41**, 118–121 (2017).

C. OHASHI, S. IZAWA, Y. SHINMURA, M. KIKUCHI, S. WATASE, M. IZAKI, H. NAITO and M. HIRAMOTO, “Hall Effect in Bulk-Doped Organic Single Crystal,” *Adv. Mater.* **29**, 1605619 (6 pages) (2017).

N. SHINTAKU, S. IZAWA, K. TAKAGI, H. NAITO and M. HIRAMOTO, “Hole- and Electron-Only Transport in Ratio-Controlled Organic Co-Deposited Films Observed by Impedance Spectroscopy,” *Org. Electron.* **50**, 515–520 (2017).

B-3) 総説，著書

M. HIRAMOTO, “Organic Solar Cells,” in *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials (2nd Edition)*, S. Kasap, P. Capper, Eds., Springer International Publishing AG; Switzerland, Part E Novel Materials and Selected Applications, Chapter E. 54, pp. 1239–1338 (2017).

M. HIRAMOTO, “Effects of Impurity Doping at ppm Level in Photovoltaic Organic Semiconductors,” in *Organic Solar Cells: Advances in Research and Applications*, M. Voronov, Ed., NOVA Science Publishers, Inc.; New York, Chap. 1, pp. 1–50 (2017).

M. HIRAMOTO, “Energetic and Nanostructural Design of Small-Molecular-Type Organic Solar Cells,” in *Advances in Chemical Physics*, S. A. Rice, A. R. Dinner, Eds., John Wiley & Sons. Inc., Vol. 162, pp. 137–204 (2017).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

M. HIRAMOTO, “Band Gap Science for Organic Solar Cells,” 16th World Nano Conference, Milan (Italy), June 2017.* (Keynote Speaker)

M. HIRAMOTO, “Effects of Impurity Doping at ppm Level in Photovoltaic Organic Semiconductors,” EMN Bali Meeting 2017, Energy Materials Nanotechnology, Bali (Indonesia), June 2017.

M. HIRAMOTO, “pn-Control of Organic Semiconductors and Application to Organic Solar Cells,” BIT’s 7th Annual World Congress of Nano Science & Technology-2017 “Welcome to a New Era of Nano-Level,” Session 402: Metals, Semiconductors, and Junction Device, Fukuoka (Japan), October 2017.

M. HIRAMOTO, “Hall effect in Bulk-Doped Organic Single Crystals,” 9th Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces (ESPMI 2017), National University of Singapore, Singapore, November 2017.

M. HIRAMOTO, “Effects of Impurity Doping at ppm Level in Photovoltaic Organic Semiconductors,” The 27th International Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-27), Area 4, 4ThO3.1, Organic and Dye-sensitized Solar Cells, Otsu (Japan), November 2017.

平本昌宏, 「有機半導体のpn制御と太陽電池への応用」, 電子情報通信学会 OME 報告会有機エレクトロニクス, 日間賀島アイランドホテル, 南知多, 2017年1月.

平本昌宏, 「有機半導体におけるドーピングによるpn制御と太陽電池応用」, 日本学術振興会情報科学用有機材料第142委員会C部会(有機光エレクトロニクス)第74回合同研究会, 東京理科大, 東京, 2017年3月.

伊澤誠一郎, 「有機半導体薄膜中のナノ構造制御と有機太陽電池への応用」, SPring-8次世代先端デバイス研究会, 東京, 2017年3月.

B-6) 受賞, 表彰

平本昌宏, 応用物理学会第11回フェロー表彰(2017).

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) “Organic Semiconductor Materials and Devices,” 31 May–4 June 2010, Takamatsu Kagawa, Japan, Programm Committee Member of the Session (2010).

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

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

27th International Photovoltaic Science and Engineering Conference (PVSEC-27), Shiga, Japan, 12–17 Nov., Area: Organic and Dye-sensitized Solar Cells, Area Chair (2017).

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 (2017–2018). (伊澤誠一郎)

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).

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).

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).

NEDO (新エネルギー・産業技術総合開発機構)「高性能・高信頼性太陽光発電の発電コスト低減技術開発」中間評価分科会分科会長代理 (2017.8–).

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

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(平成 28年度), 大阪大学中之島センター, 「有機太陽電池(I)(II)」, 2017年1月10日.

名古屋大学大学院理学研究科, グリーン自然科学国際教育研究プログラム(リーディングプログラム)集中講義「自然科学連携講義1」, 「太陽電池, 有機半導体, 有機エレクトロニクス」, 2017年12月5日, 12日.

B-9) 学位授与

大橋知佳, 「Effects of Impurity Doping at ppm Level in Organic Semiconductors」, 2017年3月, 博士(理学).

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).

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–2009年).

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–2009年).

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).

科研費基盤研究(B)(一般), 「有機単結晶エレクトロニクス」, 平本昌宏(2017年–2020年).

科研費挑戦的研究(萌芽), 「超バルクヘテロ接合有機太陽電池の開発」, 平本昌宏(2017年–2019年).

科研費研究活動スタート支援, 「混合膜中の界面構造制御による有機薄膜太陽電池の高効率化」, 伊澤誠一郎(2016年–2017年).

C) 研究活動の課題と展望

科研費「有機単結晶エレクトロニクス」(代表:平本)の遂行のために, 研究員1名(菊地)を雇用している。昨年度開発した有機単結晶ドーピング技術を突破口として, 有機単結晶エレクトロニクス分野を開拓する。昨年度着任した伊澤助教は, 有機太陽電池の開放端電圧の決定要因に関する研究を強力に推進し, 成果をあげつつある。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。

また, 博士課程学生2名(大橋(D3)2017.3卒業, 新宅(D3), および, 国際インターンシップ生, インドバナラシヒンドゥ大 Nitish Rai (M1, 2017.5–2017.8), タイ国チュラロンコン大 Sureerat Makmuang (M2, 2017.11–2018.4) が在籍している。海外の学生の確保が軌道に乗りつつある。

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) 固体 NMR による糖鎖脂質含有二重膜上で誘起されるアミロイド β 会合状態の構造解析
- b) 固体 NMR による人工らせん高分子-らせんペプチド複合体の構造解析
- c) 生体分子構造解析のための新規固体 NMR 分極移動法の開発

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。近年，この線維化が神経細胞膜上で促進されると考えられている。本研究では，モデル膜として糖鎖 GM1 を含有した脂質二重膜存在下で形成される $A\beta$ 会合中間体の構造解析により，脂質膜上で誘起されるアミロイド線維形成機構を解明することを目的として，加藤 (晃) 教授グループと共同で研究を行っている。既報 (*PLoS One* 2016) の中性脂質二重膜試料と比べ，GM1 は極性頭部の体積が大きいため GM1 含有脂質二重膜試料では有効 $A\beta$ 濃度が低下する。さらに脂質膜が不均一な為試料調製も難しく，固体 NMR 測定感度は大幅に低下した。本年は試料調製法，および測定法の大幅な改良を行い，GM1 含有脂質二重膜試料で中性脂質二重膜試料に近いスペクトル感度の達成に成功した。数々の実験検討の結果，観測信号の帰属に成功した。暫定的な二次構造解析から，中性脂質膜試料に比べ，C 末端側で少し長いシート構造を取り会合状態を形成していることが判明ししつあり，他実験により検証中である。
- b) 立体構造が制御された合成高分子であるシンジオタクチックポリメタクリル酸メチル (st-PMMA) は，トルエン溶液を高温加熱後に室温へ冷却することにより，らせん構造を形成し，溶媒分子を取り込みゲル化する。名古屋大学の八島教授のグループでは，同スキームにおいて C_{60} を共溶解することにより， C_{60} を包摂したらせん構造を有する st-PMMA の調製に成功している。我々は，約3年間同グループと共同研究を行っており，本研究では， C_{60} をキャリアーとして用い，st-PMMA のらせん内部空孔へのらせんペプチド鎖の包摂を試みた。異なる条件で調製された複数試料について 1H - ^{13}C 異種核 2D 相関固体 NMR 測定法などを用いた解析により，らせん複合体形成の正否について検証を行ってきた。その結果，完成されたスキームにより調製された試料で，st-PMMA のメチレン，メトキシ基由来の 1H 信号と C_{60} 由来の ^{13}C 信号の間で 4 Å を上限とする分子間相関信号の観測に成功した。st-PMMA らせん構造では，メチル基は外側に存在するのに対し，メチレン，メトキシ基は内側に存在する。以上のことから，固体 NMR の解析により C_{60} ペプチド誘導体が st-PMMA らせん構造内部に包摂された分子複合体を形成の検証に成功した。これ以外に，所外の3研究グループと，合成高分子や生体関連分子などの構造解析に関して共同研究を継続中である。
- c) タンパク質などの生体分子の固体 NMR を用いた構造解析で主鎖信号の帰属に用いる ^{13}C - ^{15}N 異種核相関 NMR では，double cross polarization (DCP) と呼ばれる磁気双極子相互作用に基づく分極移動法，およびその派生法が広く用いられているが，各手法には一長一短がある。本研究では，既存の DCP 法の改良から開始し，実験変数に対する十分なエラー補償能を有し，比較的簡便なセットアップで実施可能な新規測定法の開発を試みた。複数の実験条件に対する既存測定法の解析から，実験に大きな影響を与える因子を同定し，現在測定法の改良途中である。

B-1) 学術論文

N. OUSAKA, F. MAMIYA, Y. IWATA, K. NISHIMURA and E. YASHIMA, ““Helix-in-Helix” Superstructure Formation through Encapsulation of Fullerene-Bound Helical Peptides within a Helical Poly (methyl methacrylate) Cavity,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **56**, 791–795 (2017).

B-3) 総説, 著書

K. NISHIMURA, M. TANIO and S. TUZI, “Structure and Dynamics of Membrane-Bound Proteins,” in *Modern Magnetic Resonance*, Springer International Publishing AG (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-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, 「機能生体分子科学」, 2017 年 1 月 10 日, 17 日.

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).

C) 研究活動の課題と展望

現在一人で研究を行っている。生体分子を対象とした固体NMRの構造解析では、その完結に年単位の時間が必要になる。このため、研究のスループットを向上させるためには、複数の試料を平行して測定、解析する必要がある。現在解析している生体分子試料は、所内外の共同研究者に調製を依頼しているが、このアプローチには限界があり、試料調製スタッフの確保が急務であると感じている。また、分子材料の解析、測定法開発などの研究の割合を上げ、研究の速度を改善するため、以前のような3人体制を再構築したいと考えている。

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) コリネバクテリア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
- b) 細胞内の遷移金属イオン濃度恒常性維持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) 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。HtaA はリンカーでつながれた N 末端ドメイン (HtaA-N) と C 末端ドメイン (HtaA-C) から、HtaB は1つのドメインから構成されている。HtaA-N, HtaA-C, HtaB は、いずれもホロ型 (ヘム結合型) として単離精製された。本年度の研究で決定した HtaA-C および HtaB の全体構造は、以前に構造決定した HtaA-N と高い相同性を示した。いずれの構造においても、Tyr が第 5 配位子としてヘム鉄に配位しており、Tyr は近傍の His と水素結合を形成していた。また、HtaA-N で観測されていた、ヘムプロピオン酸と Ser 間での水素結合、Phe とヘムピロール環の間の π - π スタッキングも、HtaA-N, HtaA-C, HtaB すべてで保存されており、これらの相互作用が、ヘム認識に重要な役割を果たしていることを示唆している。HtaA-N, HtaA-C, HtaB の全体構造が高い相同性を示す一方、結合するヘムの配向やヘム結合部位周辺のループの長さには、違いが見られた。黄色ブドウ球菌のヘム取り込み系では、ヘム結合部位周辺のループがヘム結合タンパク質間の特異的な認識に寄与することが報告されており、HtaA/HtaB においてもループの長さの違いがヘムの輸送に関わっている可能性が考えられる。ヘム獲得・輸送反応において、ヘム軸配位子である Tyr と近傍の His 間での水素結合が果たす役割を明らかにするため、His を Ala に置換した HtaA-N, HtaA-C, HtaB の変異型タンパク質を調製した。いずれの変異体も、アポ型として単離精製されたことから、これら変異体ではヘムへの結合親和性が低下していることが分かった。これら変異体の結晶化条件のスクリーニングを行った結果、HtaA-C の H434A 変異体の結晶が得られ、その結晶構造を決定した。HtaA-C の H434A 変異体の結晶構造では、非対称単位中の 2 分子が N 末端の β -strand のドメインスワップによって二量体を形成していた。この二量体構造では、ヘムの軸配位子となる Tyr が隣り合う分子のヘム結合領域に入り込んでいることが分かった。現在、HtaA/HtaB 間でのヘム輸送反応において、タンパク質がダイナミックに構造変化 (ドメインスワッピングが起こる) することにより、ホロ型 HatA とアポ型 HtaB 間で同様な二量体構造を過渡的に形成し、ヘム輸送反応が進行するという作業仮説を立て、検証を進めている。
- b) 新生児の細菌性髄膜炎や敗血症の原因菌である連鎖球菌 *Streptococcus agalactiae* は、ヘム生合成のための酵素系を有しておらず、宿主から獲得したヘムを利用して生育する。宿主から獲得したヘムは、ヘムトランスポーターにより細胞内に取り込まれるが、フリーなヘム分子による細胞毒性を回避するために、細胞内ヘム濃度は厳密に制御される必要がある。*S. agalactiae* は、細胞内の過剰なヘム分子を感知し、それらを細胞外へ排出するヘムエクスポーター

を発現することにより、ヘムの細胞毒性を回避している。本研究では、このヘム分子感知に関与しているセンサータンパク質 PefR の構造機能相関解明を目的とした。本年度は、PefR の発現・精製系を構築し、PefR の結晶構造解明を試みた。その結果、X線結晶構造解析に適したアポ型 PefR の結晶を得ることができ、2.6Å 分解能で構造解析に成功した。PefR は、MarR ファミリーに属する転写調節因子と相同なホモ二量対構造を有しており、それぞれのサブユニットの N 末は、winged HTH (helix-turn-helix) を DNA 結合モチーフとする DNA 結合ドメインを構成していた。in vitro DNA 結合アッセイの結果、アポ型 PefR が標的 DNA に対する結合能を有しているのに対して、ヘムを結合したホロ型 PefR では、DNA 結合能が失われていることが分かった。これらの結果より、アポ型 PefR は、ヘムエクスポーター遺伝子の上流に結合することにより、ヘムエクスポーターの発現を抑制していると考えられる。また、細胞内のフリーなヘム分子が PefR に結合することによりホロ型 PefR が生成すると、標的 DNA から PefR が解離することにより、ヘムエクスポーターの発現が誘導され、その結果、過剰なヘムが細胞内から細胞外へと輸送されることで、細胞内ヘム濃度を制御していると考えられる。

B-1) 学術論文

A. PAVLOU, A. LOULLIS, H. YOSHIMURA, S. AONO and E. PINAKOULAKI, “Probing the Role of the Heme Distal and Proximal Environment in Ligand Dynamics in the Signal Transducer Protein HemAT by Time-Resolved Step-Scan FTIR and Resonance Raman Spectroscopy,” *Biochemistry* **56**, 5309–5317 (2017).

B-3) 総説, 著書

青野重利, 「フロンティア生物無機化学」, 錯体化学会フロンティア選書, 三共出版, 430–456 (2016).

B-4) 招待講演

S. AONO, “Structural characterization of heme uptake system in Corynebacteria,” 231st The Electrochemical Society Meeting, New Orleans (U.S.A.), May 2017.

青野重利, 「遷移金属が関与するシグナルセンシングとシグナル伝達」, 第 44 回生体分子科学討論会, 秋田, 2017 年 6 月.

青野重利, 「Structural basis for the heme-dependent transcriptional regulation」, 第 55 回日本生物物理学会年会, 熊本, 2017 年 9 月.

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 (2016–2017).

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).
大阪大学蛋白質研究所専門委員会委員長 (2017).
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–).
その他
総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻長 (2016–).

B-10) 競争的資金

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).
科研費若手研究(B), 「ビタミン B12 を感光色素とする新規光センサーの構造機能研究」, 村木則文 (2014年–2016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).
科研費若手研究(B), 「過渡的複合体に着目したヘムリレー輸送の分子機構の解明」, 村木則文 (2017年–2018年).
科研費基盤研究(B), 「新規な遷移金属含有型センサータンパク質の構造機能相関解明」, 青野重利 (2017年–2020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い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生命分子の構造機能解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 私たちは、糖鎖がタンパク質の細胞内における運命を決定する標識として機能していることを見出してきた。小胞体では、タンパク質に結合した N 型糖鎖の末端に付加されるわずか 1 残基のグルコース残基の有無を目印として、タンパク質の品質 (フォールディング状態) が見分けられている。2017 年度は、この品質管理システムにおいて、フォールディングセンサーとしての機能を果たしている酵素に着目して構造研究を行った。X 線結晶構造解析, X 線小角散乱法およびクライオ電子顕微鏡解析を組み合わせた構造解析により、本酵素は柔軟なモジュール構造をもつマルチドメインタンパク質であることが判った。さらに高速 AFM 解析により、センサー領域と触媒ドメインが柔軟なリンカーによって繋がれたダイナミックな分子構造動態を可視化することに成功した。以上の結果から、本酵素は可動性のマルチドメインを介して、多種多様な構造をもつ変性糖タンパク質を認識していることが推測された。一方、糖タンパク質である免疫グロブリン G (IgG) を対象とした構造解析にも取り組んだ。レプリカ交換分子動力学計算により抗体上の糖鎖の 3 次元構造ダイナミクスを解析し、糖鎖が抗体の機能部位の高次構造に及ぼす影響を定量的に評価した。また、中性子小角散乱法を用いて、受容体が結合した際の IgG の Fc 領域の構造変化を捉えることに成功した。さらに、血清中における IgG の NMR 解析を実施し、血清成分との相互作用を明らかにした。これにより、抗体が実際に機能する多成分系における NMR 解析の道筋をつけることができた。
- b) 細胞膜上の糖鎖は、均一に分散するのではなくクラスターを形成して集積化し、動的な分子認識場として機能している。こうした糖鎖の機能メカニズムの解明やその制御を行うためには、生体膜上に集積する糖鎖クラスターを模倣した化合物を合成することが不可欠である。私たちは、人工設計に基づく超分子と生命分子を融合した、サイボーグ分子の創生に取り組んでおり、今年度は、神経細胞の分化に関わる糖鎖をハイブリッドしたサイボーグ超分子を合成し、これを用いて細胞膜上糖鎖クラスターの高次機能発現メカニズムの構造基盤を解明した。NMR 分光法および動的散乱法によって本超分子の溶液内挙動を観測したところ、この超分子はカルシウムイオン依存的な糖鎖間相互作用によって、水中でより大きな自己組織化クラスターを形成することが判明した。

B-1) 学術論文

T. SUZUKI, M. KAJINO, S. YANAKA, T. ZHU, H. YAGI, T. SATOH, T. YAMAGUCHI and K. KATO, "Conformational Analysis of a High-Mannose-Type Oligosaccharide Displaying Glucosyl Determinant Recognised by Molecular Chaperones Using NMR-Validated Molecular Dynamics Simulation," *ChemBioChem* **18**, 396–410 (2017).

T. YOSHIMURA, A. HAYASHI, M. HANDA-NARUMI, H. YAGI, N. OHNO, T. KOIKE, Y. YAMAGUCHI, K. UCHIMURA, K. KADOMATSU, J. SEDZIK, K. KITAMURA, K. KATO, B. D. TRAPP, H. BABA and K. IKENAKA, "GlcNAc6ST-1 Regulates Sulfation of N-Glycans and Myelination in the Peripheral Nervous System," *Sci. Rep.* **7**, 42257 (10 pages) (2017).

M. NAGAE, S. K. MISHRA, M. NEYAZAKI, R. OI, A. IKEDA, N. MATSUGAKI, S. AKASHI, H. MANYA, M. MIZUNO, H. YAGI, K. KATO, T. SENDA, T. ENDO, T. NOGI and Y. YAMAGUCHI, “3D Structural Analysis of Protein *O*-Mannosyl Kinase, POMK, a Causative Gene Product of Dystroglycanopathy,” *Genes Cells* **22**, 348–359 (2017).

S. SAWAGUCHI, S. VERSHNEY, M. OGAWA, Y. SAKAIDANI, H. YAGI, K. TAKESHITA, T. MUROHARA, K. KATO, S. SUNDARAM, P. STANLEY and T. OKAJIMA, “*O*-GlcNAc on NOTCH1 EGF Repeats Regulates Ligand-Induced Notch Signaling and Vascular Development in Mammals,” *eLife* **6**, e24419 (2017).

E. KURIMORO, T. SATOH, Y. ITO, E. ISHIHARA, K. OKAMOTO, M. YAGI-UTSUMI, K. TANAKA and K. KATO, “Crystal Structure of Human Proteasome Assembly Chaperone PAC4 Involved in Proteasome Formation,” *Protein Sci.* **26**, 1080–1085 (2017).

T. KATO, N. KAKO, K. KIKUTA, T. MIYAZAKI, S. KONDO, H. YAGI, K. KATO and E. Y. PARK, “*N*-Glycan Modification of a Recombinant Protein via Coexpression of Human Glycosyltransferases in Silkworm Pupae,” *Sci. Rep.* **7**, 1409 (10 pages) (2017).

G. YAN, T. YAMAGUCHI, T. SUZUKI, S. YANAKA, S. SATO, M. FUJITA and K. KATO, “Hyper-Assembly of Self-Assembled Glycoclusters Mediated by Specific Carbohydrate–Carbohydrate Interactions,” *Chem. –Asian J.* **12**, 968–972 (2017).

T. KATO, K. KIKUTA, A. KANEMATSU, S. KONDO, H. YAGI, K. KATO and E. Y. PARK, “Alteration of a Recombinant Protein *N*-Glycan Structure in Silkworms by Partial Suppression of *N*-Acetylglucosaminidase Gene Expression,” *Biotechnol. Lett.* **39**, 1299–1308 (2017).

H. YAGI, H. TATENO, K. HAYASHI, T. HAYASHI, K. TAKAHASHI, J. HIRABAYASHI, K. KATO and M. TSUBOI, “Lectin Microarray Analysis of Isolated Polysaccharides from *Sasa veitchii*,” *Biosci., Biotechnol., Biochem.* **81**, 1687–1689 (2017).

R. YOGO, S. YANAKA, H. YAGI, A. MARTEL, L. PORCAR, Y. UEKI, R. INOUE, N. SATO, M. SUGIYAMA and K. KATO, “Characterization of Conformational Deformation-Coupled Interaction between Immunoglobulin G1 Fc Glycoprotein and a Low-Affinity Fc γ Receptor by Deuteration-Assisted Small-Angle Neutron Scattering,” *Biochem. Biophys. Rep.* **12**, 1–4 (2017).

T. SATOH, C. SONG, T. ZHU, T. TOSHIMORI, K. MURATA, Y. HAYASHI, H. KAMIKUBO, T. UCHIHASHI and K. KATO, “Visualisation of a Flexible Modular Structure of the ER Folding-Sensor Enzyme UGGT,” *Sci. Rep.* **7**, 12142 (10 pages) (2017).

S. KITAZAWA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and R. KITAHARA, “Interactions Controlling the Slow Dynamic Conformational Motions of Ubiquitin,” *Molecules* **22**, 1414 (12 pages) (2017).

S. YANAKA, T. YAMAZAKI, R. YOGO, M. NODA, S. UCHIYAMA, H. YAGI and K. KATO, “NMR Detection of Semi-Specific Antibody Interactions in Serum Environments,” *Molecules* **22**, 1619 (8 pages) (2017).

Y. SAKAE, T. SATOH, H. YAGI, S. YANAKA, T. YAMAGUCHI, Y. ISODA, S. IIDA, Y. OKAMOTO and K. KATO, “Conformational Effects of *N*-Glycan Core Fucosylation of Immunoglobulin G Fc Region on Its Interaction with Fc γ Receptor IIIa,” *Sci. Rep.* **7**, 13780 (10 pages) (2017).

T. TAKENAKA, T. NAKAMURA, S. YANAKA, M. YAGI-UTSUMI, M.S. CHANDAK, K. TAKAHASHI, S. PAUL, K. MAKABE, M. ARAI, K. KATO and K. KUWAJIMA, “Formation of the Chaperonin Complex Studied by 2D NMR Spectroscopy,” *PLoS One* **12**, e0187022 (15 pages) (2017).

T. KOZAI, T. SEKIGUCHI, T. SATOH, H. YAGI, K. KATO and T. UCHIHASHI, “Two-Step Process for Disassembly Mechanism of Proteasome $\alpha 7$ Homo-Tetradecamer by $\alpha 6$ Revealed by High-Speed Atomic Force Microscopy,” *Sci. Rep.* **7**, 15373 (9 pages) (2017).

B-3) 総説, 著書

Y. YAMAGUCHI, H. YAGI and K. KATO, “Stable Isotope Labeling of Glycoproteins for NMR Study,” in *NMR in Glycoscience and Glycotechnology*, K. Kato and T. Peters, Eds., RSC Publishing; Cambridge, 194–207 (2017).

M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, Y. UEKUSA and K. KATO, “NMR Characterization of the Conformations, Dynamics, and Interactions of Glycosphingolipids,” in *NMR in Glycoscience and Glycotechnology*, K. Kato and T. Peters, Eds., RSC Publishing; Cambridge, 161–178 (2017).

H. YAGI and K. KATO, “Functional Roles of Glycoconjugates in the Maintenance of Stemness and Differentiation Process of Neural Stem Cells,” *Glycoconjugate J.* **34**, 757–763 (2017).

B-4) 招待講演

K. KATO, M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, T. SUZUKI, H. YAGI, T. SATOH and T. YAMAGUCHI, “NMR views of functional roles of glycoconjugates of biological and pharmaceutical interest,” 7th Asia Pacific NMR Symposium & 23rd Annual Meeting of NMRS-India, Bangalore (India), February 2017.

K. KATO, “Structural glycobiology by stable isotope-assisted NMR spectroscopy,” Advances Isotopic Labeling Meeting for Integrated Structural Biology 2017, Grenoble (France), March 2017.

加藤晃一, 「タンパク質の運命決定と機能発現の分子構造ダイナミクス研究」, 細胞・システム作動機構の理解に向けた, 生体タンパク質分子の構造と機能のダイナミクス研究の拠点形成平成 28 年度末シンポジウム, 岡崎, 2017 年 3 月.

加藤晃一, 谷中冴子, 矢木宏和, 「バイオ医薬品への構造生物学的アプローチ」, 日本薬学会第 137 年会, 仙台, 2017 年 3 月.

K. KATO, “Structural insights into dynamic orchestration of biomolecular systems,” Frontier Bioorganization Forum 2017: Dynamical ordering and integrated functions of biomolecular systems, Taipei (Taiwan), April 2017.

M. YAGI-UTSUMI, A. SIKDAR, T. SATOH and K. KATO, “Versatile structural architectures of archaeal homolog of proteasome assembly chaperone,” Frontier Bioorganization Forum 2017: Dynamical ordering and integrated functions of biomolecular systems, Taipei (Taiwan), April 2017.

矢木-内海真穂, 「タンパク質の動的構造と分子集合メカニズムの理解を目指して」, 第 169 回薬学談話会, 名古屋, 2017 年 5 月.

加藤晃一, 「生体分子の集合離散が織りなす細胞機能研究の最前線」, 第 69 回日本細胞生物学会大会, 仙台, 2017 年 6 月.

加藤晃一, 「抗体と糖鎖の NMR」, NMR 共用プラットフォームシンポジウム——高磁場 NMR を核としたプラットフォームの新たな展開——, 横浜, 2017 年 8 月.

加藤晃一, 「プロテアソーム分子集合の構造生物学」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー・SPring-8 先端利用技術ワークショップ「SPring-8 における蛋白質構造生物学研究の現状と将来」, 吹田, 2017 年 8 月.

K. KATO, “Structural basis of quality control and trafficking of glycoproteins,” 24th International Symposium on Glycoconjugates (GLYCO24), Jeju (Korea), August 2017.

加藤晃一, 「糖鎖の生命分子科学の探究」, 第 11 回分子科学討論会, 仙台, 2017 年 9 月.

加藤晃一, 「抗体を源流とする生命分子構造学の展開」, 静岡県立大学薬学部第 264 回月例薬学セミナー, 静岡, 2017 年 9 月.

S. YANAKA, “Integrative approach for exploration and creation of dynamical ordering of biomolecular systems,” 14th HORIZONS in Molecular Biology, Göttingen (Germany), September 2017.

K. KATO, “Structural views of fate determination of glycoproteins in cells,” Seminar at Max Planck Institute for Biophysical Chemistry, Göttingen (Germany), September 2017.

S. YANAKA, “Stable isotope labeling for NMR observation of antibody glycoproteins in serum environments,” Seminar at Max Planck Institute for Biophysical Chemistry, Göttingen (Germany), September 2017.

K. KATO, M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, T. SUZUKI, H. YAGI, T. SATOH and T. YAMAGUCHI, “Structural mechanisms of carbohydrate functions,” 2017 Taiwan-Japan Biomedical Symposium on Magnetic Resonance, Tainan (Taiwan), October 2017.

K. KATO, “Dynamic ordering of biomolecular systems coupled with creation of integrated functions,” The NANOTEC-IMS Joint Research Meeting, Pathum (Thailand), October 2017.

K. KATO, “Dynamic ordering of biomolecular systems coupled with creation of integrated functions,” CU-IMS collaborative seminar, Bangkok (Thailand), October 2017.

K. KATO, “Isotope Labeling Approaches for Carbohydrates and Glycoproteins,” 第56回NMR討論会, 八王子, 2017年11月.

K. KATO, “Structural aspects of glycosylation as potential drug target,” The 19th Symposium on Advanced Concepts in New Drug Development :1st Ewha-NCU Joint Symposium, Seoul (Korea), November 2017.

加藤晃一, 「抗体への挑戦から始まった生命分子構造学の展開」, 鹿児島大学理学部先端科学講演会平成 29 年度第3回生命化学セミナー, 鹿児島, 2017 年 12 月.

矢木真穂, 「糖脂質膜上におけるタンパク質のアミロイド線維形成」, 第2回秩序化分子ワークショップ, 奈良, 2017 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「若手のカフォーラム」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).

谷中冴子, The 5th International Symposium of “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions” Poster Presentation Award (2017).

柚木康弘, 第 81 回日本生化学会中部支部会奨励賞 (2017).

與語理那, 第 81 回日本生化学会中部支部会奨励賞 (2017).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメーキング学会評議員 (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 (2016–2017).

NPO バイオものづくり中部理事 (2008–2017).

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 回バイオイメーキング学会組織委員・大会長 (2016).

第 81 回日本生化学会中部支部例会・シンポジウム世話人代表 (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 (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 (2015–2016).
公益財団法人水谷糖質科学振興財団選考委員 (2016–).
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).
公益財団法人薬学研究奨励財団選考委員 (2016–), 選考委員会幹事 (2017).
公益財団法人農林水産・食品産業技術振興協会一次書面審査専門評価委員 (2016–).
日本学術会議連携会員 (2017–).

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 (2014–2017).
Scientific Reports, Editorial board member (2015–).
International Journal of Molecular Sciences, Editorial board member (2017–).

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)
広報誌OKAZAKI 第53号「出前授業:身近な化学反応から学ぼう! タンパク質のかたちとはたらき」, 矢木真穂, 2017年3月.

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」, 2017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」, 2017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」, 2017年.

静岡県立大学薬学研究院, 非常勤講師, 第264回特別講義月例薬学セミナー, 2017年9月22日.

鹿児島大学大学院理工学研究科, 「大学院先端科学特別講義」, 2017年12月19日.

B-9) 学位授与

Arunima Sikdar, “Multiple structural architectures of archaeal homolog of proteasome-assembly chaperone,” 2017年3月, 博士(理学).

Gengwei Yan, “Characterization of the dynamic structures and interactions of Lewis X-carrying oligosaccharides and their cluster,” 2017年9月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

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連関の探査」, 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-2011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-マクロ相関の探査と設計原理の探求」, 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-2016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-2016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「きぼう」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).

科研費若手研究(B),「アミロイド線維の伸長末端の3次元構造情報に基づく重合機構の理解および創薬展開」, 矢木真穂 (2017年-).

科研費新学術領域研究「動的構造生命科学を拓く新発想測定技術——タンパク質が動作する姿を活写する——」(公募研究),「抗体の分子認識を契機とする補体系の活性化を活写する」, 谷中冴子 (2017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Fcγ受容体IIIaとの結合状態の構造解析」, 加藤晃一 (2017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 (2017年).

大陽日酸(株),「タンパク質の安定同位体標識技術の開発」, 加藤晃一 (2017年).

C) 研究活動の課題と展望

2018年は、これまでに取り組んできた生命分子システムの動秩序形成の研究成果に基づき、その特質を持った分子システムを創成することを目指した研究を展開する。既に超分子化学者との共同研究を通じて、生命分子と人工超分子のハイブリッド化を通じた機能性サイボーグ超分子の設計・創生に取り組んでいるが、これをさらに発展して超分子化学と生命分子科学の融合研究と国際共同研究を推進していく。さらに、複雑な生命分子システムの中における各構成要素のダイナミックな振る舞いを探査するアプローチ法を開拓するとともに、多角的な機能解析を併せて実施し、外部環境の変動の中で秩序創発していくロバストな生命の本質を統合的に理解することを目指していきたい。

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
- c) 先端的生体1分子計測法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) キチナーゼは結晶性キチンを加水分解しながら直進運動するリニア分子モーターである。金ナノ粒子の修飾方法の改善と酵素への結合箇所の検討により一方向性の長い運動を観測する事に成功した。運動速度は蛍光標識したキチナーゼとはほぼ同等であり，運動への金ナノプローブの影響はないと結論した。二次元ガウス関数フィットで求めた座標の軌跡をメディアフィルター処理してノイズを除去し，運動ステップの検出を行った。これにより 1.1 nm の前進ステップ運動と 1.2 nm の後退ステップ運動を検出する事に成功した。1.1 nm の前進ステップ運動について，ステップ前の停止時間の分布を解析すると2つの時定数が得られた。重水環境中で同様の解析を行った結果，遅い反応の時定数は変化しなかったのに対し速い反応のそれは 3.8 倍遅くなり，大きな同位体効果が観測された。ステップ運動の間には加水分解と生成物解離，およびキチン分子鎖の 90° ツイストと結晶表面からの脱結晶化という2つの共同的な反応素過程が起こると考えられる。これらの素過程のうち，加水分解では水素，酸素原子間の結合の組み換えが起こるため，同位体効果が大きく出ると考えられる。よって，反応の律速段階はキチン分子鎖の 90° ツイストと結晶表面からの脱結晶化であると結論づけられた。また，後退ステップ運動と後退から復帰する前進ステップ運動の時定数はほぼ同じであった。即ち，2つの状態の自由エネルギーはほぼ等しいと推測された。ドッキングモデルにより活性中心の結合エネルギーを推定すると，ステップ運動後のミカエリスコンプレックスの結合エネルギーが非常に高く，これにより脱結晶化した後のキチン分子鎖を安定化していると考えられた。
- b) 腸内連鎖球菌由来 V₁-ATPase (EhV₁) の回転運動を詳細に解析した結果，3つの触媒部位に由来する 120° のステップが 40° と 80° のサブステップから構成されている事が明らかとなった。サブステップ前の持続時間の ATP と ADP への濃度依存性を調べた所，40° ステップは ATP 結合で起こることが明らかとなった。また，加水分解が遅くなる ATP_γS を基質に用い，加水分解は 40° ステップ前に起こることが明らかとなった。さらに，ATP_γS に ADP を混合すると，80° のバックステップをする事が明らかとなった。同様に，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た変異体を用いて ATP と ADP を混合して観測すると，80° のバックステップが観測された。80° バックステップ前の停止の持続時間は ADP 濃度に依存する事から，80° ステップは ADP の解離により起こると結論した。以上の解析により，EhV₁ の化学力学共役機構をほぼ完全に明らかにした。
- c) 金ナノ粒子をプローブに用いた生体1分子計測の位置決定精度，および時間分解能の改善に取り組んだ。金ナノ粒子の粒径，照明用レーザーの強度，画像のピクセルサイズ，輪帯照明光学系の導入により，100 μs の時間分解能で 3 Å の位置決定精度を達成した。また，金ナノ粒子と銀ナノ粒子の単粒子散乱スペクトルの取得，および金・銀ナノ粒子をプローブに用いた二色同時観察を達成した。

B-1) 学術論文

M. TACHIOKA, A. NAKAMURA, T. ISHIDA, K. IGARASHI and M. SAMEJIMA, “Crystal Structure of Family 6 Cellobiohydrolase from the Basidiomycete *Phanerochaete chrysosporium*,” *Acta Crystallogr., Sect. F: Struct. Biol. Cryst. Commun.* **73**, 398–403 (2017).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. FUJIMOTO, Y. MORITA, R. IINO, M. TOMISHIGE, H. SHINTAKU, H. KOTERA and R. YOKOKAWA, “Linear zero mode waveguides for the study of chemo-mechanical coupling mechanism of kinesin,” *2017 IEEE 30th International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS)*, 64–67 (2017).

J. ANDO, T. SEKIYA, DEN KA, H. YAMAKOSHI, K. DODO, M. SODEOKA, S. KAWATA and K. FUJITA, “Surface-enhanced Raman scattering (SERS) imaging of alkyne-tagged small molecule drug in live cells with endocytosed gold nanoparticles,” *SPIE BiOS 2017 Proceedings*, 1004606-1 (2017).

B-3) 総説, 著書

飯野亮太, 「分子モーターの1分子イメージング」, *生体の科学* [特集: 細胞多様性解明に資する光技術一見て, 動かす], **68**, 388–389 (2017).

立岡美夏子, 中村彰彦, 石田卓也, 高橋幸子, 巖 斌, 田仲広明, 古林直樹, 伊中浩治, 五十嵐圭日子, 鮫島正浩, 「水素原子の可視化を目指したセルラーゼの大型結晶作製」, *宇宙における高品質タンパク質結晶化技術の伝承と可能性*, **34(1)**, 340108 (6 pages) (2017).

安藤 潤, 藤田克昌, 「ラマン分光顕微鏡とライフサイエンス応用」, *光アライアンス*, **28(6)**, 52–57 (2017).

飯野亮太, 安藤 潤, 中村彰彦, 「金ナノプローブでタンパク質分子モーターのダイナミックな動きを観る」, *JSMI Report* **11(1)**, 11–16 (2017).

B-4) 招待講演

R. IINO, “High-speed single-molecule imaging analysis of protein molecular motors probed by gold nanoparticles and nanorods,” DAC seminar on dynamical ordering and integrated functions of biomolecular systems, Department of Applied Chemistry, National Chiao Tung University, Hsinchu (Taiwan), November 2017.

R. IINO, “Chitinase A is 1-nm stepping Brownian motor decomposing crystalline polysaccharide,” NANOTEC-IMS joint research meeting, Pathum Thani (Thailand), October 2017.

R. IINO and A. NAKAMURA, “Stepping motion and chemo-mechanical coupling of chitinase resolved by single-molecule analysis,” IUPAB2017 “Molecular Machinery,” Edinburgh (U.K.), July 2017.

R. IINO, “High-speed single-molecule measurement of molecular motors with metallic nanoprobe,” KAKENHI International symposium on “Studying the function of soft molecular systems,” Sapporo (Japan), June 2017.

R. IINO, “Chemo-mechanical coupling mechanisms of linear and rotary molecular motors revealed by high-speed single-molecule imaging analysis,” Frontier bioorganization forum 2017: Dynamical ordering and integrated functions of biomolecular systems, Taipei (Taiwan), April 2017.

R. IINO, “Single-molecule dynamics of natural and engineered molecular motors,” The 5th international symposium on “Dynamical ordering & integrated functions,” Komaba, Tokyo (Japan), January 2017.

飯野亮太, 「高速1分子イメージング解析で明らかとなったタンパク質分子モーターの化学力学共役機構」, 高分子討論会シンポジウム「「柔らかな」生体および合成高分子系の解明と構築」, 愛媛大学, 松山, 2017年9月.

飯野亮太, “Chemo-mechanical coupling mechanisms of linear and rotary molecular motors revealed by high-speed single-molecule imaging analysis,” 第55回生物物理学会年会シンポジウム「Softness and functions of biological molecules under various environments」, 熊本大学, 熊本, 2017年9月.

飯野亮太, 「機動分子科学: 生体分子, 人工分子を超えて」, 第17回蛋白質科学学会年会ワークショップ「機動分子科学」, 仙台国際センター, 仙台, 2017年6月.

飯野亮太, 「金ナノプローブで生体分子モーターのダイナミックな動きを観る」, 分子イメージング学会学術集会シンポジウム「生命の神秘に迫る分子イメージング」, 横浜港大さん橋ホール, 横浜, 2017年5月.

飯野亮太, 「生体分子機械を観る, 操る, 壊す, 創る」, 海洋研究開発機構第13回新機能研究開拓研究グループセミナー, 海洋研究開発機構, 横須賀, 2017年5月.

飯野亮太, 「金ナノプローブでタンパク質1分子の動きはどこまで見えるか」, 研究会「分子観察による生命の階層横断的な理解」, 分子科学研究所, 岡崎, 2017年3月.

中村彰彦, 五十嵐圭日子, 「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」, 分子研研究会「触媒反応であるタンパク質反応を分子科学的観点から捉える」, 分子科学研究所, 岡崎, 2017年6月.

中村彰彦, 「1分子解析によりセルラーゼ/キチナーゼの何が見えるのか」, セルラーゼ研究会, 佐久平プラザ 21, 佐久, 2017年7月.

A. NAKAMURA and R. IINO, “Direct Observation of 1 nm Steps of Chitinase A Molecules with Gold Nano Probes,” Selected short talk in Gordon Research Conference Cellulases & Other Carbohydrate-Active Enzymes, Proctor Academy, Andover (U.S.A.), July 2017.

J. ANDO, M. SODEOKA and K. FUJITA, “Alkyne-tag Raman imaging and screening of small molecules in biological systems,” Biomedical Molecular Imaging 2017, Taipei (Taiwan), November 2017.

安藤 潤, 藤田克昌, 袖岡幹子, “Raman scattering microscopy and alkyne-tag for imaging and screening of bio-active small molecules,” 第55回生物物理学会年会シンポジウム「Softness and functions of biological molecules under various environments」, 熊本大学, 熊本, 2017年9月.

B-5) 特許出願

Application number: US15/351,522, “Kit for sealing beads and detecting target molecule,” H. NOJI, R. IINO and S. ARAKI (JST), Publication date: Apr 27, 2017, Filing date: Nov 15, 2016.

B-6) 受賞, 表彰

石渡大貴, 日本化学会東海支部長賞 (2017).

安藤 潤, 日本分光学会平成 29年度年次講演会若手講演賞 (2017).

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

- 日本生物物理学学会代議員 (2014–2016).
- 日本生物物理学学会分野別専門委員 (A-13. モータータンパク質) (2014).
- 日本生物物理学学会分野別専門委員 (E-04. タンパク質工学) (2016).
- 日本分光学会中部支部幹事 (2017.10–). (安藤 潤)

学会の組織委員等

- 第 25 回日本バイオイメーキング学会学術集会副大会長 (2016).

学会誌編集委員

- 日本生物物理学学会学会誌「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).
- 日本生物物理学学会小中高校への講師派遣サポート事業講師 (2016.11–).
- 出前授業「温度と分子の状態」, 岩津中学校 (2017). (中村彰彦)

B-8) 大学での講義, 客員

- 京都大学大学院農学研究科, 非常勤講師, 「応用生命科学特論 IV」, 2017 年 7 月 6 日–7 日.
- 名古屋大学大学院理学研究科, 非常勤講師, 「物性生物物理学総合講義」, 2017 年 11 月 6 日.

B-10) 競争的資金

- 科研費挑戦的研究(萌芽), 「結晶性多糖表面を動きながら連続的に分解する酸化還元型酵素を創る」, 飯野亮太 (2017 年–2018 年).
- 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, 「プラズモニクナノ粒子による生体分子のマルチカラー 1 分子イメーキング法の開発」, 安藤 潤 (2017 年).
- 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).
- 科研費若手研究(B), 「高速高精度一分子観察による結晶性糖質分解機構の解明」, 中村彰彦 (2016 年–2017 年).
- 科研費新学術領域研究「動的構造生命」(公募研究), 「高時空間分解能一分子観察と理論解析を組み合わせた分子モーター運動解析法の開発」, 中村彰彦 (2016 年–2017 年).
- 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, 「金ナノロッドの高速高精度光学イメーキ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).

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

セルラーゼ,キチナーゼは,運動方向が逆の分子を同時に作用させると結晶性多糖の分解活性が大きく上昇する「シナジー効果」が報告されている。*TrCel6A* と *TrCel7A*, および *SmChiA* と *SmChiB* の混合によるシナジー効果の機構を明らかにする。セルラーゼについてはさらに,各ドメインの役割が分かっている *TrCel6A* と *CfCel6B* をベースに用いてドメイン交換したキメラ酵素の作製を行う。キチナーゼについては *SmChiA* と運動方向が逆である *SmChiB* の運動機構の解明,および運動に必要な構造要素の解明を行う。解明した運動機構を基に *SmChiA* と *SmChiB* を組み合わせたハイブリッド酵素の作製を行う。回転分子モーター V-ATPase は, V_1 のサブステップのトルクの測定, および V_0V_1 複合体の1分子計測を行う。また,分子科学研究所古賀グループとの共同研究により, V_1 の A サブユニットにATP 結合能を付加した非天然型モーターの創成を行っている。1分子計測で回転速度, ATP, ADP の親和性, およびサブステップの角度等を野生型と比較する。先端的生体1分子計測法の開発については,位置決定精度と時間分解能の更なる改善,合金ナノ粒子を用いたマルチカラーイメージング,プラズモンカップリングを用いたプラズモンルーラーの開発に取り組む。

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) 粒子を内包したベシクルにおける混みあいと自発的偏在

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 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。現在, 高分子重合のための単量体のうち一種について, 設計・合成を完了しつつある。
- b) 細胞の内部の生体高分子は, 自由に動ける領域を増大するよう自身や周囲の構造を変化させ, このエントロピックな作用は「排除体積効果」と呼ばれる。我々は, 排除体積効果を示すモデルとして, 大小二種のポリスチレンビーズを稠密に封入したベシクルを調製した。大粒子を高密度に内包したベシクルを作成し, その挙動を粒子集団の自由エネルギー変化に基づき解析した。

B-1) 学術論文

Y. NATSUME, H. WEN, T. ZHU, K. ITOH, L. SHENG and K. KURIHARA, “Water-in-Oil Emulsion Centrifugation Method to Prepare Giant Vesicles Encapsulating Micrometer-Sized Particles,” *J. Vis. Exp.* **119**, e55282 (2017).

B-3) 総説, 著書

K. KURIHARA, M. MATSUO, T. YAMAGUCHI and S. SATO, “Synthetic Approach to Biomolecular Science by Cyborg Supramolecular Chemistry,” *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1862**, 358–364 (2017).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

栗原顕輔, 「化学的人工細胞が提案する生命起源への戦略」, ABC ミニワークショップ「低温度周りの光合成」, 東京, 2017年3月.

K. KURIHARA, “Basic Research on Primitive Cell Model Based on Lipid World Hypothesis,” The 4th Astrobiology Workshop, Tokyo (Japan), March 2017.

K. KURIHARA, “Strategy for Origin of Life Proposed by Chemical Artificial Cell,” ELSI International Workshop “Reconstructing the Phenomenon of Life—To Retrace the Emergence of Life—,” Tokyo (Japan), May 2017.

栗原顕輔, 「化学的リボ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」, 花王・芸術科学財団助成研究発表会, 東京, 2017年6月.

K. KURIHARA, “Chemical Cell Models Based on Self-Reproducing Vesicles,” Japan-China Joint Interdisciplinary Symposium on Coordination-Based Hybrid Materials, Okazaki (Japan), June 2017.

栗原顕輔, 「化学的人工細胞モデルで探る生命起源」, 第19回進化学会年次大会, 京都, 2017年8月.

K. KURIHARA, “Development of the Vesicle-type Artificial Cell,” 6th International Conference on Biology, Chemistry and Agronomy, Guadalajara (Mexico), September 2017.*

栗原顕輔, 「油滴-ベシクル変換システムを基盤とする人工細胞の創成」, 第2回秩序化分子システムワークショップ, 奈良, 2017年12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」, 2017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).

科研費若手研究(A), 「表現型と遺伝子型が連携する人工細胞モデルの創成」, 栗原顕輔 (2017年-2021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-2017年).

花王芸術・科学財団化学・物理学分野助成, 「化学的リボ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-2017年).

自然科学研究機構アストロバイオロジーセンタープロジェクト研究, 「原始的なタンパク質を内包する原始細胞モデルの創成とその挙動解析」, 栗原顕輔 (2017年-2018年).

C) 研究活動の課題と展望

本研究では生物再構成の考えから, 既知の分子で生命らしい機能や挙動を示すシステムを創成することを目標とする。課題 a) では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, 人工細胞の境界膜であるベシクルを形成する概念を提案した。現在は, システインを基本骨格とした自発的ペプチド形成を軸にしているが, 他のアミノ酸や高分子でも検討している。課題 b) では細胞内のこみあい状態を表現したモデルを作成したが, サンプル調製や各ベシクルについての解析に時間がかかっている。今後はより作成しやすい液滴などベシクル以外のソフトマテリアルにも挑戦したいと考えている。また剛体球内包型のベシクルモデルだけでなく, 内部に封入する物質も柔らかい高分子などについても取り組みたいと考えている。

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環境依存的構造変化の解析
- b) 環形動物の脳内光受容機能を担うタンパク質の解析
- c) アゲハチョウ尾端光受容機能を担うタンパク質の探索
- d) 回転セルを用いた光受容タンパク質の赤外分光解析

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。一方で TWIK-1 というカリウムチャネルは、細胞外環境に応じて適度にナトリウムイオンを透過し、細胞の静止膜電位の調節に関係している。昨年までに、TWIK-1 タンパク質を脂質小胞に再構成した試料を用いて、アミド I 領域のスペクトル変化が、イオン選択性を生み出す選択フィルタ部位周辺の構造的特徴を反映していることを見出した。今年度は、名古屋大学の内橋貴之教授との共同研究として高速原子間力顕微鏡を用いた構造動態解析を行った。さらに琉球大学の東雅大助教との共同研究として基準振動計算も行った。得られた結果から、アミド I 領域のスペクトル変化が、TWIK-1 の選択フィルタ部位に由来することを、より明確にすることができた。
- b) 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おり、種々の動物で、脳が直接外界の光環境を感知することが知られている。とりわけ、環形動物ゴカイの脳ではたらく光受容タンパク質 Opn3 が、紫外光を感知することを見出し、また紫外光受容をもたらすアミノ酸残基も特定した (*J. Biol. Chem.* 誌に発表)。ゴカイの幼生は動物プランクトンとして活動し、太陽からの紫外光ダメージを避けるために日中は深部に移動することが知られている。すなわち Opn3 による紫外光感知は、プランクトンの生態を理解するためにも重要だと思われる。塚本助教は、このような知見を基に JST さきがけ研究として、脳機能を光でコントロールするツールとして Opn3 を利用する研究プロジェクトを開始した。
- c) 昆虫のアゲハチョウは尾端（お尻の先）に光受容細胞を持ち、それが交尾や産卵などの生殖行動に関与していることを、総合研究大学院大学の蟻川謙太郎教授らが報告している。学融合推進センターの公募型研究事業として、この尾端光受容機能を担う光受容タンパク質の同定をめざしている。蟻川教授と東京農工大学の内山博允博士と共同でアゲハチョウ尾端組織について RNA-seq 解析を行い、その組織で多く発現している光受容タンパク質候補を見出した。さらに、その候補タンパク質を培養細胞で発現し、このタンパク質が尾端受容器と同様に、紫外光を主に吸収することを見出した。
- d) 光受容タンパク質は光反応後に構造変化を経て機能発現を行うが、その後、失活したり、初期状態に戻るまで長時間を要するものがある。これまで装置開発室と共同して、光受容タンパク質試料を連続的に計測点に送り出す回転セルの開発を進めている。自然科学研究機構の若手分野間連携プロジェクトとして、基礎生物学研究所の得津隆太郎助教および河合寿子博士ならびに岡山大学の梅名泰史准教授に光化学系 II の試料を提供いただき、その光反応を赤外分光計測により解析している。

B-1) 学術論文

G. KASUYA, Y. FUJIWARA, H. TSUKAMOTO, S. MORINAGA, S. RYU, K. TOUHARA, R. ISHITANI, Y. FURUTANI, M. HATTORI and O. NUREKI, “Structural Insights into the Nucleotide Base Specificity of P2X Receptors,” *Sci. Rep.* **7**, 45208 (10 pages) (2017).

H. TSUKAMOTO, I-S. CHEN, Y. KUBO and Y. FURUTANI, “A Ciliary Opsin in the Brain of a Marine Annelid Zooplankton is Ultraviolet-Sensitive, and the Sensitivity is Tuned by a Single Amino Acid Residue,” *J. Biol. Chem.* **292**, 12971–12980 (2017).

S. HAESUWANNAKIJ, T. KIMURA, Y. FURUTANI, K. OKUMURA, K. KOKUBO, T. SAKATA, H. YASUDA, Y. YAKIYAMA and H. SAKURAI, “The Impact of the Polymer Chain Length on the Catalytic Activity of Poly(*N*-vinyl-2-pyrrolidone)-Supported Gold Nanoclusters,” *Sci. Rep.* **7**, 9579 (8 pages) (2017).

B-4) 招待講演

古谷祐詞, 「赤外分光法によるイオンチャネルタンパク質の分子機構解析」, 平成 28 年度末シンポジウム (主催: 自然科学研究機構) 自然科学研究における機関間連携ネットワークによる拠点形成事業生理学研究所プロジェクト「細胞・システム作動機構の理解に向けた, 生体タンパク質分子の構造と機能のダイナミクス研究の拠点形成」, 生理学研究所, 岡崎, 2017 年 3 月。
古谷祐詞, 「イオンチャネルへの赤外差分分光計測の適用」, 研究会「分子観察による生命の階層横断的な理解」 (主催: 自然科学研究機構) 自然科学研究における機関間連携ネットワークによる拠点形成事業「分子観察による物質・生命の階層横断的な理解」, 分子科学研究所, 岡崎, 2017 年 3 月。

Y. FURUTANI, “Time-Resolved FTIR Spectroscopy on Microbial Rhodopsins and Other Membrane Proteins,” International Symposium on Biophysics of Rhodopsins, Kyoto University, Kyoto (Japan), May 2017.

Y. FURUTANI, “Application of Infrared Spectroscopy to Study the Ion Selectivity of Potassium Ion Channels,” The 6th Asian Spectroscopy Conference (ASC6), Tsing Hua University, Hsinchu (Taiwan), September 2017.

H. TSUKAMOTO, “Molecular Mechanisms Regulating Functional Properties of Non-Visual Opsins in Animals,” International Symposium on Biophysics of Rhodopsins, Kyoto University, Kyoto (Japan), May 2017.

塚本寿夫, I-Shan Chen, 久保義弘, 古谷祐詞, 「動物プランクトンの脳ではたらく紫外光受容体の分光・電気生理解析」, 第2回イオンチャネル研究会, 東北大学, 仙台, 2017 年 8 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, 岡本基土, 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

- 日本生物物理学会理事 (2015–2016).
- 日本生物物理学会代議員 (2015–2016, 2017–2018), 委員 (2010–2011, 2012–2013).
- 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 (2012–2017).
- 日本生物物理学会分野別専門委員 (2012). (塚本寿夫)

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).

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).
- 日本生物物理学会「生物物理」誌編集委員 (2017–2019). (塚本寿夫)

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」, 2017年11月15日.
- 総合研究大学院大学物理科学研究科, 「構造生体分子科学」, 2017年12月7日, 8日.

B-10) 競争的資金

- 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, 「イオンチャン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).

科研費若手研究(B),「哺乳類カリウムチャネルの環境依存的イオン透過制御メカニズムの解明」,塚本寿夫(2017年-2018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「萌芽的共同研究」,「アゲハチョウの眼外紫外光受容タンパク質と生殖行動との連関」,塚本寿夫(2017年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「内在受容体を利用した生命機能の新規光操作手法の開発」,塚本寿夫(2017年-2020年).

C) 研究活動の課題と展望

これまで膜タンパク質の分子機構について、赤外分光計測を主要な手法として研究を行ってきた。哺乳動物細胞を用いた試料調製系を用いることで、カリウムチャネルTWIK-1、紫外光センサーであるOpn3など、タンパク質研究でよく用いられている大腸菌では試料調製が困難な膜タンパク質の解析に成功している。また、装置開発室との共同で、回転セルを用いた時間分解赤外分光計測系の開発にも取り組んでいる。塚本助教はこれまでの研究成果を基にJSTのさきがけ研究を開始している。また、藤 貴夫准教授を代表とするJSTのCREST研究も開始され、古谷は主たる共同研究者として、新規赤外分光計測の生体試料への応用を担当している。今後は、得られている成果を着実に論文にまとめ、新たな実験手法を構築するなどし、膜タンパク質の分子機構研究をさらに発展させていきたい。

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きがけて成功した。
- 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, H. YOSHIDA, A. OHNO, T. SATO, T. MASE and Y. UOZUMI, “Huisgen Cycloaddition with Acetylene Gas by Using an Amphiphilic Self-Assembled Polymeric Copper Catalyst,” *Heterocycles* **95**, 715–721 (2017).

Y. UOZUMI, Y. MATSUURA, T. SUZUKI, T. ARAKAWA and Y. M. A. YAMADA, “Palladium-Catalyzed Asymmetric Suzuki–Miyaura Cross Coupling with Homochiral Phosphine Ligands Having Tetrahydro-1*H*-imidazo[1,5-*a*]indole Backbone,” *Synthesis* **49**, 59–68 (2017).

G. HAMASAKA, T. MUTO, Y. ANDOH, K. FUJIMOTO, K. KATO, M. TAKATA, S. OKAZAKI and Y. UOZUMI, “Detailed Structural Analysis of a Self-Assembled Vesicular Amphiphilic NCN-Pincer Palladium Complex by Wide-Angle X-Ray Scattering and Molecular Dynamics Calculations,” *Chem. –Eur. J.* **23**, 1291–1298 (2017).

A. SAKON, R. II, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA, R. NOMURA and A. OHTAKA, “Detailed Mechanism for Hiyama Coupling Reaction in Water Catalyzed by Linear Polystyrene-Stabilized PdO Nanoparticles,” *Organometallics* **36**, 1618–1622 (2017).

F. K.-C. LEUNG, F. ISHIWARI, Y. SHOJI, T. NISHIKAWA, R. TAKEDA, Y. NAGATA, M. SUGINOME, Y. UOZUMI, Y. M. A. YAMADA and T. FUKUSHIMA, “Synthesis and Catalytic Applications of a Triptycene-Based Monophosphine Ligand for Palladium-Mediated Organic Transformations,” *ACS Omega* **2**, 1930–1937 (2017).

T. S. SYMEONIDIS, A. ATHANASOULIS, R. ISHII, Y. UOZUMI, Y. M. A. YAMADA and I. N. LYKAKIS, “Photocatalytic Aerobic Oxidation of Alkenes into Epoxides or Chlorohydrins Promoted by a Polymer-Supported Decatungstate Catalys,” *ChemPhotoChem* **1**, 479–484 (2017).

T. OSAKO, K. TORII, S. HIRATA and Y. UOZUMI, “Chemoselective Continuous-Flow Hydrogenation of Aldehydes Catalyzed by Platinum Nanoparticles Dispersed in an Amphiphilic Resin,” *ACS Catal.* **7**, 7371–7377 (2017).

S. PAN, S. YAN, T. OSAKO and Y. UOZUMI, “Batch and Continuous-Flow Huisgen 1,3-Dipolar Cycloadditions with An Amphiphilic Resin-Supported Triazine-Based Polyethyleneamine Dendrimer Copper Catalyst,” *ACS Sustainable Chem. Eng.* **5**, 10722–10734 (2017).

B-4) 招待講演

Y. UOZUMI, “Development of Novel Heterogeneous Catalytic Systems,” IMS-IPCMS Joint Symposium, Strasubourg (France), May 2017.

Y. UOZUMI, 「未来の化学合成を支える超活生グリーン触媒を目指して」, 第6回JACI/GSC シンポジウム, 東京(日本), 2017年7月.

Y. UOZUMI, 「連続フロー触媒反応システムの開発: エステル化および Huisgen 環化反応」, 新学術領域第4回公開成果報告会, 京都(日本), 2017年7月.

Y. UOZUMI, “Molecular architecture-based administration of catalysis in water via self-assembly of amphiphilic palladium pincer complexes,” 6th Gratama Workshop, Groningen (Netherlands), October 2017.

Y. UOZUMI, “A Showcase of Novel Immobilized Catalysis for Organic Transformations,” Department Seminar, Three Gorges University, Yichang (China), November 2017.

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).

大迫隆男, Thieme Chemistry Journal Award (2017).

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(2002–2017).

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・サステイ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。理想の有機分子変換を標榜した当研究室の歩みの中で多くの水中機能性固定化錯体触媒, 水中機能性固定化ナノ金属触媒を開発し, その幾つかは汎用性ある触媒として市販されるに至っている。これらの研究は科学研究費補助金(基盤研究, 新学術研究など)にくわえ, 多くの競争的外部研究費を得て推進してきた。即ちこれまでに水中機能性固定化触媒に関する「グリーンナノ触媒」CREST 研究(2002年10月–2008年3月), 続いてその成果を実践的に発展させるMETI-NEDO プロジェクト(2008年9月–2012年2月), 稀少元素の元素循環・元素減量・元素代替に焦点を当てた「元素戦略」CREST 研究(2011年10月–2017年3月)を展開してきた。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, 現在同研究所・環境資源科学研究センターにて展開中である。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も大いに注力しており, 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。なかでも最近は無開拓元素群の触媒反応性(とくにCu, Fe, Ag)の探索と確立, さらには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。加えて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り, 学術的にも大きなチャレンジである。

楳山儀恵(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) ヨウ化ペルフルオロアリアルを母骨格とするハロゲン結合供与体触媒の設計・開発
- d) ハロゲン結合を活用する分子インプリント高分子触媒反応場の開発
- e) エチニルビスピリジンを配位子とするヨードニウム錯体触媒の開発
- f) 触媒材料および炭素材料の開発に向けたペルフルオロペリレン化合物の合成研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) カンファスルホン酸触媒存在下、窒素上に2,2-置換ペンテニル基を有するアルジミンの形式的1,3-転位反応に成功した。光学的に純粋な反応基質を用いた場合に極めて高い不斉転写率で転位反応が進行することを見出した。また、HPC SYSTEMS, 鈴木グループとの共同研究により、本反応の反応機構を明らかにした。
- 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として、ホスフィン酸-リン酸を設計・合成した。合成した触媒が、アルデヒド水和物とジエン類とのヘテロ Diels-Alder 反応において、良好なエナンチオ選択性を与えることを見出した。
- 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、クロチル化反応、プレニル化反応の触媒として機能することを見出した。また、江原グループとの共同研究により、本反応の触媒作用機構を明らかにした。
- d) ハロゲン結合供与部位を有する高分子担体を用いて、DMAPを鋳型とする鋳型重合により、DMAPインプリント高分子を合成した。合成したDMAPインプリント高分子が、アシル基転移反応の疎水性触媒反応場として有効であることを見出した。
- e) エチニルビスピリジンを配位子とするヨードニウム錯体触媒の合成に成功した。また、本錯体触媒が、ピコリンとケテンシリルアセタールとの向山アルドール反応において、高い触媒活性を示すことを見出した。
- f) 触媒材料および炭素材料の開発を目的として、ペルフルオロペリレン化合物の合成研究を開始した。本研究課題は、鈴木グループとの共同研究として進めている。構成素子となるテトラフルオロナフタレンやヘキサフルオロナフタレンの合成を行い、合成経路の確立に向けて有益な知見を得た。

B-4) 招待講演

楳山儀恵, 「ハロゲン結合とペルフルオロアリアルで拓く合成化学」, 統合物質創製化学推進機構第3回国内シンポジウム, 京都大学化学研究所, 京都, 宇治, 2017年10月.

N. MOMIYAMA, "Anion-Binding Catalysis via Hydrogen and/or Halogen Bonding," The 8th International Meeting on Halogen Chemistry, Inuyama, Aichi, September 2017.

N. MOMIYAMA, "Catalysis via Hydrogen and/or Halogen Bonding," Japan-China Joint Interdisciplinary Symposium on Coordination-Based Hybrid Materials, Okazaki, Aichi, June 2017.

N. MOMIYAMA, "Anion Transport Catalysis via Halogen Bond Interaction," International Symposium on Pure and Applied Chemistry 2017, Ho Chi Minh City (Vietnam), June 2017.

榎山儀恵, 「ペルフルオロアリーの分子修飾と有機分子変換への活用 水素結合からハロゲン結合への新展開」, セントラル硝子株式会社化学研究所, 埼玉, 川越, 2017年5月.

榎山儀恵, 「分子建築の匠をめざして」, 市民公開講座第111回分子科学フォーラム・特別編, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2017年2月.

B-5) 特許出願

特願 2016-253620, 「環上に置換基を有する含窒素環状化合物の製造方法」, 榎山儀恵, 泉閣督人(自然科学研究機構), 2016年.

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).

分子研シンポジウム主催 (2017).

学会誌編集委員

日本化学会化学と工業編集委員 (2017).

その他

出前授業愛知県立岡崎北高等学校 (2016, 2017).

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 (2015).

B-10) 競争的資金

平成 29年度研究助成金・アステラス病態代謝研究会, 「非金属錯体触媒による医薬品構成素子合成法の開発」, 榎山儀恵 (2017年-2018年).

平成 29年度調査研究助成・鈴木謙三記念医科学応用研究財団, 「ヨロドニウム錯体触媒による抗悪性腫瘍薬スピロ環状ラクトンの環境調和合成法の開発」, 榎山儀恵 (2017年-2018年).

科研費基盤研究(C) (一般),「ホスフィン酸を活性中心とする新規キラルプレンステッド酸触媒の開発」, 榎山儀恵 (2017年–2019年).

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,「ペルフルオロピ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リアル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・O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、本来的にキララ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、キララ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。2017年度は、従来困難であったいくつかの有機分子変換に成功し、国際学会での招待講演で発表した。また、学術誌への投稿に向けて、準備を整えることができた。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ラ化学からキララ分子の振る舞いを明らかにするキララ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) 金属錯体の規則配列によるフレームワーク触媒の開発
- c) 金属錯体触媒と有機触媒との複合によるハイブリッド触媒系の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 鉄やルテニウムなどの8族金属イオンを有する金属錯体を対象に、多電子酸化還元反応に対する触媒の開発に取り組んだ。その結果、同一の分子骨格を有する一連の8族金属錯体群が創製され、金属イオンの性質が酸素発生触媒能に与える影響に関する知見が得られた。また、分子中に広い π 共役性の置換基を導入した錯体触媒についても研究を展開した。得られた触媒分子においては、導入した置換基が基質の認識として機能し、置換基を有しない触媒分子と比較し、二酸化炭素還元能が向上することが見出された。
- b) 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とを併せ持つパドルホイール型二核錯体に対し、分子間相互作用サイトを導入した触媒モジュールを開発し、モジュールの自己集合により反応場を有するフレームワークの構築に成功した。このフレームワークの触媒能について評価を行ったところ、高い耐久性を有し、簡便な分離操作により再利用可能な光水素発生触媒として機能することが判明した。更に、触媒モジュールならびにフレームワーク触媒の物性測定からその触媒反応機構に関しても明らかにした。
- c) 金属錯体・有機触媒・光触媒を組み合わせたハイブリッド触媒系を開発し、室温・可視光の温和な条件下で有機分子のCatalytic acceptorless dehydrogenation (CAD) に成功した。またそれぞれの触媒分子単独ならびに各種触媒及び基質の共存条件において光化学・電気化学測定を行い、触媒反応機構に関する知見を得ることに成功した。

B-1) 学術論文

S. KATO, Y. SAGA, M. KOJIMA, H. FUSE, S. MATSUNAGA, A. FUKATSU, M. KONDO, S. MASAOKA and M. KANAI, "Hybrid Catalysis Enabling Room-Temperature Hydrogen Gas Release from *N*-Heterocycles and Tetrahydronaphthalenes," *J. Am. Chem. Soc.* **139**, 2204–2207 (2017).

Y. OKABE, S. K. LEE, M. KONDO and S. MASAOKA, "Syntheses and CO₂ Reduction Activities of π -Expanded/Extended Iron Porphyrin Complexes," *J. Biol. Inorg. Chem.* **22**, 713–725 (2017).

M. WANG, V. ARTERO, L. HAMMARSTRÖM, J. MARTINEZ, J. KARLSSON, D. GUST, P. SUMMERS, C. MACHAN, P. BRUEGGELLER, C. D. WINDLE, Y. KAGESHIMA, R. COGDELL, K. R. TOLOD, A. KIBLER, D. H. APAYDIN, E. FUJITA, J. EHRMAIER, S. SHIMA, E. GIBSON, F. KARADAS, A. HARRIMAN, H. INOUE, A. KUDO, T. TAKAYAMA, M. WASIELEWSKI, F. CASSIOLA, M. YAGI, H. ISHIDA, F. FRANCO, S. O. KANG, D. NOCERA, C. LI, F. D. FONZO, H. PARK, L. SUN, T. SETOYAMA, Y. S. KANG, O. ISHITANI, J.-R. SHEN, H.-J. SON and S. MASAOKA, "Molecular Catalysts for Artificial Photosynthesis: General Discussion," *Faraday Discuss.* **198**, 353–395 (2017).

M. YOSHIDA, M. KONDO, M. OKAMURA, M. KANAIKE, S. HAESUWANNAKIJ, H. SAKURAI and S. MASAOKA, "Fe, Ru, and Os Complexes with the Same Molecular Framework: Comparison of Structures, Properties and Catalytic Activities," *Faraday Discuss.* **198**, 181–196 (2017).

B-3) 総説, 著書

岡村将也, 正岡重行, 「酸素発生触媒の開発——金属錯体によるアプローチ——」, *月刊機能材料* **37(4)**, 51–59 (2017).

近藤美欧, 正岡重行, 「錯体化学的アプローチ2——酸素発生反応」, 「光触媒/光半導体を利用した人工光合成——最先端科学から実装技術への発展を目指して——」, エヌ・ティー・エス, pp. 99–106 (2017). (ISBN: 978-4-86043-477-9)

近藤美欧, 「Bio-relevant な金属錯体を用いた酸素発生触媒の開発」, *化学と工業* **70(10)**, 888–889 (2017).

B-4) 招待講演

S. MASAOKA, "Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation," 4th Japan-Taiwan-Singapore-Hong Kong Quadrilateral Symposium on Coordination Chemistry, Hong Kong (China), December 2017.

正岡重行, 「太陽系外惑星において起こり得る光合成反応の分子科学的考察」, 2017年度生命科学系学会合同年次大会 (ConBio2017) ワークショップ「アストロバイオロジー: 地球と宇宙での生命探査」, 神戸ポートピアホテル, 神戸, 2017年12月.

S. MASAOKA, "Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation," the 4th Japan-Canada Joint Symposium on Coordination Chemistry, Fukuoka and Miyazaki (Japan), November 2017.

S. MASAOKA, "Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation," American Chemical Society (ACS) Asia-Pacific International Chapters Conference, Jeju (Korea), November 2017.

S. MASAOKA, "Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation," The NANOTEC-IMS Joint Research Meeting, NANOTEC, Klong Nueng (Thailand), October 2017.

S. MASAOKA, "Pentanuclear iron catalysts for water oxidation," 11th Japan-China Joint Symposium on Metal Cluster Compounds, Nagoya University, Nagoya (Japan), October 2017.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」, 第10回ChemBio ハイブリッドレクチャー, 東京大学浅野キャンパス, 東京, 2017年9月.

S. MASAOKA, "Pentanuclear iron catalysts for water oxidation," The 2nd Japan-US Bilateral Meeting on Coordination Chemistry, Hokkaido University, Sapporo (Japan), September 2017.

S. MASAOKA, "Pentanuclear iron catalysts for water oxidation," The 6th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC6), Melbourne (Australia), July 2017.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」, 奈良女子大学講演会, 奈良女子大学, 奈良, 2017年7月.

S. MASAOKA, "Pentanuclear iron catalysts for water oxidation," Molecular Technology: "Energy and electron transfers in molecular engineered materials," Strasbourg (France), June 2017.

S. MASAOKA, "Molecular catalysts for water oxidation," Japan-China Joint Interdisciplinary Symposium on Coordination-Based Hybrid Materials, Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), June 2017.

S. MASAOKA, "Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation," International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2017, Ho Chi Minh City (Vietnam), June 2017.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」, 先端科学・材料技術部会高選択性反応分科会講演会, 新化学技術推進協会 (JACI) 会議室, 東京, 2017年6月.

正岡重行,「水分子の特異な触媒的変換反応の開発」,日本化学会第 97 春季年会特別企画「精密設計反応場を利用した高難度変換反応の開発」,慶応義塾大学日吉キャンパス,横浜,2017年3月.

正岡重行,「金属錯体の機能連動による触媒創出」,分子研研究会「金属錯体の情報制御と機能連動」,分子科学研究所,2017年3月.

S. MASAOKA, “A Penta-iron Water Oxidation Catalyst,” 2017 International Conference on Artificial Photosynthesis, Ritsumeikan University, Kyoto (Japan), March 2017.

S. MASAOKA, “Fe, Ru, and Os Complexes with the Same Molecular Framework: Comparison of Structures, Properties and Catalytic Activities,” Faraday Discussion: Artificial Photosynthesis, Ritsumeikan University, Kyoto (Japan), March 2017.

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5回公開シンポジウム,東工大蔵前会館,東京,2017年1月.

S. MASAOKA, “Water Oxidation Catalyzed by Transition Metal Complexes,” 第7回「フォーラム：人工光合成」,東工大蔵前会館,東京,2017年1月.

正岡重行,「人工光合成への挑戦～金属錯体を用いた酸素発生触媒の開発～」,教育研究評議会(第50回),自然科学研究機構,2017年1月.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation—Challenges to Artificial Photosynthesis—,” Welcome Visit of Dalian University of Technology to IMS & SOKENDAI, Institute for Molecular Science, Okazaki (Japan), January 2017.

近藤美欧,「鉄5核錯体による高活性酸素発生触媒の創製」,平成29年度膜タンパク質研究会,淡路夢舞台国際会議場,兵庫県淡路市,2017年10月.

M. KONDO, “Asymmetric assembly of metal ions in multinuclear complexes,” 錯体化学会第67回討論会,北海道大学,北海道札幌市,2017年9月.

近藤美欧,「分子モジュールの自己集合による超分子フレームワークの創製」,第11回超分子若手懇談会,箱根路開雲,神奈川県足柄下郡箱根町,2017年9月.

M. KONDO, “Molecular modules for framework catalysts,” Thirteenth International Workshop on Supramolecular Nanoscience of Chemically Programmed Pigments (SNCP17), Ritsumeikan University, Kusatsu, Shiga, June 2017.

近藤美欧,「生体機能模倣による高活性な酸素発生触媒の開発」,分子研研究会「触媒反応であるタンパク質反応を分子科学的観点から捉える」,分子科学研究所,愛知県岡崎市,2017年6月.

B-6) 受賞, 表彰

S. K. LEE, 4th Japan-Taiwan-Singapore-Hong Kong Quadrilateral Symposium on Coordination Chemistry, Chemistry Letters Young Award (2017).

伊豆 仁, 第50回酸化反応討論会ポスター賞 (2017).

Pondchanok Chinapang, 錯体化学会第67回討論会ポスター賞 (2017).

榎本孝文, 錯体化学若手研究会「錯体化学若手の会夏の学校 2017」優秀ポスター賞 (2017).

近藤美欧, 第19回守田科学研究奨励賞 (2017).

Pondchanok Chinapang, Energy & Environmental Science Outstanding Student Presentation Award (2017).

Pondchanok Chinapang, International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2017), Excellent Poster Award (2017).

伊豆 仁, International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2017), Excellent Poster Award (2017).
正岡重行, 平成 28 年度日本学術振興会賞 (2016).
岡村将也, 正岡重行, 近藤美欧, 第5回ネイチャー・インダストリー・アワード特別賞 (2016).
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

分子研研究会「Cutting-Edge Researches in Coordination Chemistry and Photochemistry」主催 (2017).
アジア連携分子研研究会「日中合同若手学際シンポジウム～配位化学を基盤とした次世代複合材料」主催 (2017).
分子研研究会「触媒反応であるタンパク質反応を分子科学的観点から捉える」所内対応 (2017).
分子研研究会「金属錯体の情報制御と機能運動」主催 (2017).

分子研研究会「金属錯体の非対称配位圏設計と異方集積化が拓く新物質創成科学」所内対応 (2016).
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」, 2017 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

伊東貴弘, 「Design, Construction and Reactivity of Porous Frameworks with Substitution—Labile Sites」, 2017 年 3 月, 博士(理学).
岡部佑紀, 「Synthesis, Properties and Catalytic Activities for CO₂ Reduction of Porphyrins and Porphyrin Complexes Bearing π -Conjugated Substituents」, 2017 年 3 月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域研究(計画研究), 「光化学的刺激/電気化学的刺激による金属錯体触媒のオンデマンド活性化」, 正岡重行 (2017 年–2021 年).
科研費新学術領域研究(公募研究), 「アシンメトリック金属イオン集積に立脚した新奇機能性分子群の創製」, 近藤美欧 (2017 年–2018 年).
科研費挑戦的研究(萌芽), 「結晶性ホストへの戦略的機能統合による革新的触媒システムの構築」, 近藤美欧 (2017 年–2019 年).
徳山科学技術振興財団研究助成, 「多核異種金属錯体のオンデマンド合成による高効率な二酸化炭素還元触媒系の創出」, 近藤美欧 (2016 年–2017 年).
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).
科研費新学術領域研究(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).
科研費新学術領域研究(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かけ研究「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).

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。2017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) 金属錯体の規則配列によるフレームワーク触媒の開発、c) 金属錯体触媒と有機触媒との複合によるハイブリッド触媒系の開発、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、8族金属イオンを有する錯体のみならず、他の金属イオンを有する金属錯体触媒の開発に着手し、水の四電子酸化反応、還元、N₂還元等の多岐にわたる多電子酸化還元反応に対する高活性な触媒の創出に取り組みたい。b) については、様々な構造・反応性を有する分子モジュールを用いて種々のフレームワークを開発し、特異な反応場が触媒機能に与える影響について追究したい。c) では、2017年までに構築したハイブリッド触媒系ならびに反応機構解析により得られた知見を礎に、新たな反応性を有するハイブリッド触媒系の創出に向けた研究を展開する。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。

KaiC の自律的な動的構造変化, そして他の Kai タンパク質 (KaiA, KaiB) との相互作用に伴う構造変化をモニターするため, 蛍光標識された KaiC を複数調製した。様々な条件下で蛍光強度の変化を調べたところ, ATP 加水分解反応と共役して KaiC の構造が変化し, これに伴って KaiC と他の Kai タンパク質の親和性や相互作用するタイミングが制御されていることを解明した。

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. AKIYAMA, A. MUKAIYAMA, J. ABE and Y. FURUIKE, "Cyanobacterial Circadian Clock System: How and Why Can It Be So Slow and Stable?" *Biological Clocks: with reference to suprachiasmatic nucleus*, 73-77 (2017).

N. NUEMKET, N. YASUI, Y. KUSAKABE, Y. NOMURA, N. ATSUMI, S. AKIYAMA, E. NANGO, Y. KATO, M. K. KANEKO, J. TAKAGI, M. HOSOTANI and A. YAMASHITA, "Structural Basis for Perception of Diverse Chemical Substances by T1r Taste Receptors," *Nat. Commun.* **8**, 15530 (10 pages) (2017).

I. ANZAI, E. TOKUDA, A. MUKAIYAMA, S. AKIYAMA, F. ENDO, K. YAMANAKA, H. MISAWA and Y. FURUKAWA, "A Misfolded Dimer of Cu/Zn-Superoxide Dismutase Leading to Pathological Oligomerization in Amyotrophic Lateral Sclerosis," *Protein Sci.* **26**, 484-496 (2017).

B-4) 招待講演

S. AKIYAMA, “Cyanobacterial circadian clock system: How and why can it be so slow and stable?” Sokendai Asian Winter School, 分子科学研究所, 岡崎, December 2017.

S. AKIYAMA, “Frequency characteristics as a basis for meta-tuning of the Cyanobacterial Circadian Clock,” ConBio2017, 神戸ポートアイランド, 神戸, December 2017.

S. AKIYAMA, “The frontier in cyanobacterial circadian clock system,” OIIB Summer School 2017, Okazaki (Japan), August 2017.

S. AKIYAMA, “Biological X-Ray Solution Scattering Activities at the Institute for Molecular Science,” Okazaki Conference 2017 on Grand Challenges in Small-Angle Scattering, Okazaki (Japan), March 2017.

S. AKIYAMA, “Atomic-scale origins of slowness and temperature compensation in KaiC,” Circadian Clock of Cyanobacteria during 1991-2017, Nagoya (Japan), March 2017.

秋山修志, “Frequency Characteristics and Temperature Compensation in the Cyanobacterial Circadian Clock,” 第24回日本時間生物学会学術大会, 京都大学, 京都, October 2017.

秋山修志, “Lessons from Cyanobacterial Circadian Clock System,” 第55回日本生物物理学会年会, 熊本大学, 熊本, September 2017.

秋山修志, 「生命の時間」, 第4回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム, 秋葉原UDX, 東京, September 2017.

秋山修志, 「藍藻生物時計システムにおける概日周期の根源と貫階層性」, 第69回日本細胞生物学会大会, 仙台国際センター, 仙台, June 2017.

秋山修志, 「生物の不思議～体内時計～」, 日本放射光学会市民公開講座, 神戸芸術センター, 神戸, January 2017.

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).

秋山修志, 日本学術振興会賞 (2016).

秋山修志, 向山 厚, 文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム平成28年度利用6大成果賞 (2017).

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, 2017).

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線溶液散乱講習会主催 (2015–).

Okazaki Conference 2017 on Grand Challenges in Small-angle Scattering, Organizer (2017).

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–).

日本生物物理学会「生物物理」会誌副編集委員長 (2016–2017).

日本放射光学会「放射光」会誌編集委員 (2013–2015).

日本結晶学会「日本結晶学会」会誌編集委員 (2010–2012).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきかけ研究, 「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).

科研費基盤研究 (A), 「生物時計システムの周期と温度補償制御ロジックの構造化学的解明」, 秋山修志 (2017 年–2019 年).

科研費基盤研究 (S), 「統合的多階層アプローチによるシアノバクテリア生物時計システムの新展開」, 秋山修志 (2017 年–2021 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 年からは基盤研究 (S) 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) $\alpha\beta$ 型タンパク質構造のゼロからのデザイン；これまでに2次構造パターンやループの長さといった局所主鎖構造が3次構造トポロジーの決定に重要であることを発見し、それらの関係性を3つのルールとして体系化している。これまでに、これらのルールを用いることで100残基以下の様々なトポロジーと形状の $\alpha\beta$ 型タンパク質構造のデザインに成功してきた。今年度は、これらのルールがより大きなサイズのタンパク質をデザインする際においても有効であるかどうか検証するため、100残基以上の大きさのタンパク質構造のデザインに取り組んだ。その結果、これら3つのルールのみでは不十分であり、ルールを用いて描いた主鎖構造設計図と、実際に主鎖構造を組み立てたときの3次構造の整合性を考慮する必要があることが明らかになった。これらを考慮して計算機でデザインしたタンパク質を大腸菌に組み込み発現・精製し、生化学実験によって折り畳み能を調べたところ、デザインしたタンパク質は安定な構造を形成していた。さらに、NMRにより構造を決定したところ、計算機上で構築したデザインモデルと一致していた。
- b) 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、 α ヘリカル構造は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。これまでに、一つの形状の α ヘリカル構造について、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。現在はこのデザインのX線およびNMRによる構造解析、さらには他の形状を持つ α ヘリカル構造のデザインを行なっている。
- c) 折り畳みに必須なアミノ酸の種類探索；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は、これら20種類のアミノ酸全てが必要なの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すものである。現在は、NMRによりこの変異体の構造決定を行っている。
- d) 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。続いて、生化学実験によりデザインタンパク質の ATP 結合親和性の測定を行ったが、ATP に対して高い結合親和性を示さなかった。現在は、高い ATP 結合親和性を示すタンパク質のデザインに向けて、様々な方面から研究を行っている。

- e) 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、計算機デザインを行い、生化学実験によりデザインタンパク質のヘム結合能を調べたところ、ヘムに結合していることが明らかになった。
- f) 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. M. 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,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **114**, 10648–10653 (2017).

Y.-R. LIN, N. KOGA, S. M. VOROBIEV and D. BAKER, “Cyclic Oligomer Design with De Novo $\alpha\beta$ -Proteins,” *Protein Sci.* **26**, 2187–2194 (2017).

P. NORDENFELT, T. MOORE, S. MEHTA, J. KALAPPURAKKAL, V. S. SWAMINATHAN, N. KOGA, T. LAMBERT, D. BAKER, J. WATERS, R. OLDENBOURG, T. TANI, S. MAYOR, C. M. WATERMAN and T. SPRINGER, “Direction of Actin Flow Dictates Integrin LFA-1 Orientation during Leukocyte Migration,” *Nat. Commun.* **8**, 2047 (16 pages) (2017).

B-4) 招待講演

古賀信康, 「分子をデザインする」, 市民公開講座第 111 回分子科学フォーラム・特別編, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2017年2月.

古賀信康, 「Rational design of protein molecules from structure to function」, 第 17 回日本蛋白質科学会ワークショップ「細胞内外で機能する人工蛋白質のボトムアップデザイン」, 仙台国際センター, 仙台, 2017年6月.

古賀信康, 「タンパク質分子の構造から機能の合理設計」, 神戸大学先端融合科学シンポジウム「非共有結合系の分子科学：構造と機能」, 神戸大学理学部, 神戸, 2017年7月.

古賀信康, 「ゼロからのタンパク質分子構造デザイン」, 第7回合成生物工学シンポジウム, 神戸大学百年記念館六甲ホール, 神戸, 2017年8月.

古賀信康, 「主鎖から合理設計するタンパク質分子」, 東京大学大学院工学系研究科化学生命工学専攻, 第 10 回 ChemBio ハイブリッドレクチャー, 東京大学武田ホール, 東京, 2017年9月.

古賀信康, 「ゼロからのタンパク質分子構造デザイン」, 「細胞を創る研究会」10.0 シンポジウムセッション(ほほま) ゼロから創る人工細胞, 京都教育文化センター, 京都, 2017年10月.

古賀信康,「タンパク質分子の合理デザイン」,JST-CRDS ライフサイエンス・臨床医学分野生命工学区分俯瞰ワークショップ:多階層研究の統合が拓くデザインバイオ〜予測に基づく生命分子・システムの設計に向けて〜,市ヶ谷カンファレンスセンター,東京・2017年10月.

小杉貴洋,“Design of ATP Binding Site from Scratch and in V1-ATPase,”第17回日本蛋白質科学会年会,仙台国際センター,仙台,2017年6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27-29年度分野別専門委員:タンパク質設計・ドラッグデザイン(2015-2017).

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(2016.9.4).

創価大学大学院工学研究科勉強会(創価大学大学院(東京八王子市))講師(2017.6.30).

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構アストロバイオロジーセンタープロジェクト研究,「地球上に存在しないトポロジーを持つタンパク質分子の合理設計」,古賀信康(2017年-2018年).

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,「創って理解するモータータンパク質の動作原理」,古賀信康(2016年-2019年).

内閣府革新的研究開発推進プログラム(ImPACT),「タンパク質構造の合理的安定化手法の開発:βグルコシダーゼの耐熱化」,古賀信康(2017年-2019年).

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さかけ研究,「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).

C) 研究活動の課題と展望

今年度は総勢10名で活動を行なった。それぞれのメンバーが計算および実験手法に習熟してきており,研究結果を出すことに集中出来ている。研究は,タンパク質デザインと自然界のタンパク質構造の改造の2本柱で展開しており,それぞれ順調に結果が出始めている。今後の課題は,タンパク質デザイン手法を洗練させることで計算機デザインをより高速化する必要がある。

鹿野 豊 (特任准教授(若手独立フェロー))(2012年2月16日~2017年3月31日)*)

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) 光の状態の可視化
- c) スクイーズド光生成
- d) 振動状態分光技術を応用した天文学機器の開発

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、定性的な範囲内で反転分布のないレーザー発振メカニズムに成功し、その量子凝縮体としての性質を明らかにすることに成功した。また、固体中のディラック電子を用いた量子制御に関する理論も提案し、トポロジカル絶縁体上で実現する方法を考案した。
- b) 分子をありのままに計測する手法の一つとして、分子の状態を光の状態に転写し、光を計測することが考えられる。そのため、光自身の持つ状態を光の空間自由度に転写することにより、可視化することが可能になる。これらの転写方法に対する提案を行っている。エンタングルメント偏光状態に対して、可視化の技術だけでエンタングルメント判定が出来る条件を見つけ、光の伝搬位相であるゲイ位相も可視化することが出来ることを発見した。
- c) スクイーズド光は位相計測において感度が高くなる手法として広く用いられているが、スクイーズド光自体を発生するメカニズムを理論的に研究している。量子測定理論を応用し、疑似スクイーズド光を発生させるメカニズムを提案することに成功した。また、この光を応用することで小さい領域での位相計測の感度を従来のものより良くすることが出来ることを見いだした。
- d) 振動状態分光を応用した天文学機器の開発を行っている。中赤外線領域における地上での天文学は、OH夜光と呼ばれる昼間に蒸発した水蒸気の振動状態から得られる発光により、高視野の撮像が困難とされている。そのため、水の精密振動状態分光データを用いて、高視野を維持したままOH夜光のスペクトルを除去するためのフィルター設計を行っている。また、重力波天文学に関して、高精度の観測のために日本のKAGRAと呼ばれる光干渉計型重力波望遠鏡では懸架鏡の熱雑音を除去するために低温懸架技術開発を行っている。そのプロトタイプ機の作成に協力した。

B-1) 学術論文

- Y. SHIKANO**, "How to Realize One-Dimensional Discrete-Time Quantum Walk by Dirac Particle," *Interdiscip. Inform. Sci.* **23**, 33–37 (2017).
- M. TUKIAINEN, H. KOBAYASHI and Y. SHIKANO**, "Quantification of Concurrence via Weak Measurement," *Phys. Rev. A* **95**, 052301 (6 pages) (2017).

F. MATSUOKA, A. TOMITA and Y. SHIKANO, “Generation of Phase-Squeezed Optical Pulses with Large Coherent Amplitudes by Post-Selection of Single Photons and Weak Cross-Kerr Nonlinearity,” *Quant. Stud.: Math. Found.* **4**, 159–169 (2017).

T. HORIKIRI, T. BYRNES, K. KUSUDO, N. ISHIDA, Y. MATSUO, Y. SHIKANO, A. LOFFLER, S. HOFLING, A. FORCHEL and Y. YAMAMOTO, “Highly Excited Exciton-Polariton Condensates,” *Phys. Rev. B* **95**, 245122 (5 pages) (2017).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. SHIKANO, “Toward tangible quantum nature,” *AIP Conf. Proc.* **1871**, 020001 (7 pages) (2017).

B-3) 総説, 著書

鹿野 豊, 野尻美保子, 高安美佐子, 田中忠芳, 「物理と社会シンポジウム「ダイバーシティの中での物理教育」報告」, *大学の物理教育* **23**, 48–52 (2017).

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)」, *物性研究* **6**, 064210 (10 pages) (2017).

B-4) 招待講演

Y. SHIKANO, “Introduction to discrete-time quantum walk,” 8th Jagna International Workshop: Structure, Function, and Dynamics: from nm to Gm, Research Center for Theoretical Physics (RCTP), Jagna, Bohol (Philippines), January 2017.

鹿野 豊, 「弱測定を用いた量子状態推定」, 東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究「量子測定の物理と情報通信」, 東北大学電気通信研究所, 仙台, 2017年3月.

鹿野 豊, 「自己双対性のあるコインを用いた離散時間量子ウォーク」, 第72回日本物理学会年次大会「量子ウォークの深化とその周辺」(領域11, 領域1), 大阪大学豊中キャンパス, 大阪, 2017年3月.

Y. SHIKANO, “Discrete-Time Quantum Walk in Solid-State System,” 5th Awaji International Workshop on “Electron Spin Science and Technology: Biological and Materials Science Oriented Applications,” Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji (Japan), June 2017.

鹿野 豊, 「量子ウォークの実現方法」, ドレスト光子・光合成・量子ウォーク, ドレスト光子研究起点, 横浜, 2017年7月.

Y. SHIKANO, “Quantum Dynamical Simulation by Quantum Walk,” 6th International Conference on New Frontiers in Physics (ICNFP 2017), Kolymbari, Crete (Greece), August 2017.

Y. SHIKANO, “Visualizing Quantum States,” Quantum Information and Quantum Simulation Day (QIQSD), Universite Pierre et Marie Curie, Paris (France), September 2017.

Y. SHIKANO, “Gender role in Japan from Gender Summit 10,” 19th SPVM National Physics Conference, University of San Carlos, Cebu (Philippines), October 2017.

Y. SHIKANO, “Patter Formation in Reaction-Diffusive Vicsek Model,” 5th International Complex Systems Meeting in 19th SPVM National Physics Conference, University of San Carlos, Cebu (Philippines), October 2017.

鹿野 豊, 「Visualizing Optical States」, IMI Colloquium, 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所, 福岡, 2017年11月.

Y. SHIKANO, “Nonlinear Quantum Walk,” NITheP Research Workshop: Open Quantum Walks, Salt Rock Hotel, Salt Rock, KZN (South Africa), November 2017.

Y. SHIKANO, “Quantum Phase through Quantum Tunneling,” 3rd International Conference on Quantum Foundations, Panache Hotel, Patna (India), December 2017.

Y. SHIKANO, “Quasi-Squeezed Coherent State,” International Workshop on Quantum Information, Quantum Computing and Quantum Control 2017, Shanghai University, Shanghai (China), December 2017.

B-6) 受賞, 表彰

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

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

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

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

電子情報通信学会量子情報技術特別研究専門委員会委員 (2017–).

科学技術振興機構主催 Gender Summit 10 組織・運営委員会部会委員 (2016–2017).

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 (2014–2017).

日本物理学会男女共同参画推進委員会委員 (2014–2017).

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 (2015–2016).

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

Atom, Editorial Board Member (2017–).

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

- 東京工業大学博士後期課程全学説明会 (2017).
- 鎌倉学園高校アカデミックキャンプ (2017).
- Fusion フェスタ in Tokyo 2017, 「重力波で観る天体観測の夜明け」(2017).
- 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

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(C), 「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

2017年3月で若手独立フェローの5年の任期を終えました(実際には1ヶ月強の延長申請があるが)。着任当初から比べると実験と理論との協奏による光物性理論および量子光学分野における研究活動が出来た一方で, 研究成果を深化させるフェーズを迎えることはこの5年の任期中にはなかった。独立した研究室を主宰するということで, 海外からのインターンシップ学生を積極的に迎え入れ, これまでの専門分野に立脚した研究テーマを広げることが出来た一方, これまで培ってきた技法を基に始めた新しい研究の方向性に関しては, 研究テーマの方向性, 魅力に気づいたタイミングで研究室をたたまなくてはなくなってしまった。今後, これまで得た知見を現在の職位と職務内容の中で, どれくらいのスピード感をもって, また, どのような形で研究成果に結びつけることが出来るのかということが課題である。更には, 分子研在職中に培った多くの知見・人脈を基にし, 独自のサイエンス像を描いていくことが今後の個人的な課題である。

*) 2017年4月1日東京大学先端科学技術研究センター特任准教授

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⁻ 導電性酸水素化物のイオン導電機構解析
- c) 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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) H⁻ 導電体の物質探索が進展し, 新たに Ba₂LiH_{3-2x}O_{1+x} と Ba₂MHO₃ (M = Sc, Y) の合成に成功した。Ba₂LiH_{3-2x}O_{1+x} は, 300 °C で 10⁻² S·cm⁻¹ を越える極めて高い H⁻ 導電特性を示した。一方, Ba₂MHO₃ (M = Sc, Y) 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) La_{2-x-y}Sr_{x+y}LiH_{1+x+y}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, H₂ + 2e⁻ ⇌ 2H⁻ の反応が Pd 電極で可逆的に進行することを確認した。
- c) H⁻ 導電体を電解質に用いた固体デバイスを作製し, アノード電極での水素化・脱水素化反応を検討し, 高速で水素化反応が進行することを見出した。

B-1) 学術論文

K. SOMA, S. KONINGS, R. ASO, N. KAMIUCHI, G. KOBAYASHI, H. YOSHIDA and S. TAKEDA*, “Detecting Dynamics Responses of Materials and Devices under an Alternating Electric Potential by Phase-Locked Transmission Electron Microscopy,” *Ultramicroscopy* **181**, 27–41 (2017).

A. WATANABE, G. KOBAYASHI*, N. MATSUI, M. YONEMURA, A. KUBOTA, K. SUZUKI, M. HIRAYAMA and R. KANNO, “Ambient Pressure Synthesis and H⁻ Conductivity of LaSrLiH₂O₂,” *Electrochemistry* **85**, 88–92 (2017).

B-3) 総説, 著書

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電体の開発と新型電池への応用可能性」, *応用物理* **86(12)**, 1084–1087 (2017).

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電性酸水素化物」, *セラミックス* **52(12)**, 829–832 (2017).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

G. KOBAYASHI, “Hydride Ion Conduction in Oxyhydrides,” 3rd Solid-State Chemistry & Ionics (SCI) workshop: Bulk diffusion and surface of oxides, Kyusyu University, Fukuoka (Japan), November 2017.*

小林玄器, 菅野了次, 「ヒドリドイオン導電性酸水素化物の開発」, 平成 29年度物質科学研究会, フクラシア八重洲会議室 K, 東京, 2017年 10月.*

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電体の開発と蓄電・発電デバイスへの応用可能性」, 第7回CSJ化学フェスタ 2017, タワーホール船堀, 東京, 2017年 10月.

小林玄器, 「H⁻ 導電性酸水素化物の開発と電気化学デバイスへの応用可能性」, 第13回固体イオニクスセミナー, 宮崎フェニックスシーガイアリゾート, 宮崎, 2017年9月.*

G. KOBAYASHI, “Synthesis and H⁻ Conductivity of Ba-Li oxyhydride,” IUMRS-ICAM 2017 15th International Conference of Advanced Materials, Kyoto (Japan), August 2017.

G. KOBAYASHI, “Study on Hydride Ion Conductive Oxyhydrides,” 2017 Hydrogen Metal Systems Gordon Research Conference, Making the Hydrogen Economy Work—New Developments and Recent Applications, Easton, MA (U.S.A.), July 2017.*

G. KOBAYASHI, “Relationship between anion arrangement and H⁻ conductivity in La-Sr-Li oxyhydride system,” 21st International Conference on Solid State Ionics, Padua (Italy), June 2017.

G. KOBAYASHI, “Study on H⁻ Conductive Oxyhydrides for Next-Generation Battery Systems,” 21st International Conference on Solid State Ionics, Padua (Italy), June 2017. (Final selection for The ISSI Young Scientist Award)

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電性酸水素化物の開発」, 第2回固体化学フォーラム, 東北大学金属材料研究所, 仙台, 2017年6月.

G. KOBAYASHI, “Hydride Ion Conduction Oxyhydrides,” 8th International Conference on Electroceramics, Nagoya (Japan), May 2017.

菅野了次, 小林玄器, 「ヒドリドイオンが固体中を動く——新物質創成と電気化学デバイスへの期待」, 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学, 横浜, 2017年3月.

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電性酸水素化物の物質開発」, 第163回アドバンスト・バッテリー技術研究会「ポスト電池討論会」, 大阪科学技術センター, 大阪, 2017年3月.*

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電体の開発」, 2016年度量子ビームサイエンスフェスタ, つくば国際会議場, つくば, 2017年3月.

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電性酸水素化物の物質開発」, Workshop on Materials Science under Ultra-High Pressure 2017, 愛媛大学, 松山, 2017年3月.

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」, 日本技術士会化学部会講演会, 日本技術士会館, 東京, 2017年1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 (2013).

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).

第 58 回高压討論会実行委員 (2017).

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」, 2017 年 10 月 14 日.

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域「複合アニオン化合物の創製と新機能」(公募研究), 「ヒドリド超イオン導電体の物質探索」, 小林玄器 (2017 年–2018 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).

科学技術振興機構さきかけ研究「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(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).

C) 研究活動の課題と展望

H⁻ 導電性酸水素化物の物質探索および新規イオニクスデバイスの創製

着任時から一貫して取り組んできた H⁻ 導電性酸水素化物の物質探索については, Ba₂LiH_{3-2x}O_{1+x} の合成に成功したことで大きく進展した。Ba₂LiH_{3-2x}O_{1+x} が 300–400 °C で示す H⁻ 導電特性 ($\sigma \geq 10^{-2} \text{ S cm}^{-1}$) は, プロトン (H⁺) による従来の水素のイオン輸送では達成できなかった特性である。プロトン (H⁺) による水素のイオン伝導では, 水または酸化物イオンとの結合を介して H⁺ が伝導するため, 水を固体内に結晶水として留めることができない, または H–O 結合の束縛が強いなどの理由から, 中温域 (200–400 °C) で優れた導電特性が得られない。これに対し, H⁻ はバルク内で欠陥を介して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と考えられる。今後は, 今中性子準弾性散乱, 固体 NMR, 高温中性子回折などを組み合わせ, H⁻ のイオン導電機構を明らかにしたい。

H⁻ のイオン導電現象の電池反応への応用に関しては, 合成した酸水素化物を固体電解質に用いた電気化学デバイスを作製し, 水素化・脱水素化反応への応用を検討した。H⁺ を用いた従来技術と比較して高効率に反応が進行することが明らかとなり, 水素化・脱水素化反応における H⁻ 利用の優位性が認められた。今後は, 反応の原理検証, デバイス構成の最適化, H⁻ が関与する素反応の開拓を目指す。

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]₂X (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。本年は単分子膜への化学ドーピングによって単分子膜モットFETの作製に成功し、両極性動作や電界効果ドーピングによるバンドギャップの異常を見いだした。また、 κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂などの類縁物質についてもFET作製を行い、その動作を計測した。
- b) 上記モット絶縁体のモットハバードギャップを、歪みや静電キャリアドーピングで小さくしていくと、低温において超伝導状態が実現することが予想されている。そこで基板からの歪みを制御することによって極限まで電荷ギャップを小さくしたFETを作製し、これにゲート電圧を印加することによって、電界誘起超伝導を実現した。これまで開発してきたプラスチック基板の曲げによるバンド幅制御と、イオン液体ゲートトランジスタによるフィリング制御とを組み合わせることによって、モット絶縁体近傍の超伝導相がどのように分布しているかを検証した。その結果、pドープ領域とnドープ領域で、大きな非対称性が確認された。これは以前、Al₂O₃/SrTiO₃基板を用いた際に見られた非対称性と基本的に合致しているだけでなく、これをさらにバンド幅制御して三次元相図の完成に近づけるものである。
- 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こ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

E. TISSEROND, J. N. FUCHS, M. O. GOERBIG, P. AUBAN-SENZIER, C. MEZIERE, P. BATAIL, Y. KAWASUGI, M. SUDA, H. M. YAMAMOTO, R. KATO, N. TAJIMA and M. MONTEVERDE, "Aperiodic Quantum Oscillations of Particle-Hole Asymmetric Dirac Cones," *Europhys. Lett.* **119**, 67001 (2017).

F. YANG, M. SUDA and H. M. YAMAMOTO, “Fabrication and Operation of Monolayer Mott FET at Room Temperature,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **90**, 1259–1266 (2017). (Selected for BCSJ Award Article)

H. YAMAKAWA, T. MIYAMOTO, T. MORIMOTO, T. TERASHIGE, H. YADA, N. KIDA, M. SUDA, H. M. YAMAMOTO, R. KATO, K. MIYAGAWA, K. KANODA and H. OKAMOTO, “Mott Transition by an Impulsive Dielectric Breakdown,” *Nat. Mater.* **16**, 1100–1105 (2017).

M. SUDA, N. TAKASHINA, S. NAMUANGRUK, N. KUNGWAN, H. SAKURAI and H. M. YAMAMOTO, “N-Type Superconductivity in an Organic Mott Insulator Induced by Light-Driven Electron-Doping,” *Adv. Mater.* **29**, 1606833 (5 pages) (2017).

Y. SATO, Y. KAWASUGI, M. SUDA, H. M. YAMAMOTO and R. KATO, “Critical Behavior in Doping-Driven Metal–Insulator Transition on Single-Crystalline Organic Mott-FET,” *Nano Lett.* **17**, 708–714 (2017).

B-4) 招待講演

H. M. YAMAMOTO, “Strongly Correlated Electrons in Organic Field-Effect- Transistors,” IGER symposium, Nagoya (Japan), December 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Organic superconducting FET as an ideal transistor,” RIES-Hokudai symposium, Sapporo (Japan), November 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistor with Electric-Field-Induced Phase Transitions,” RSC Materials Horizons Symposium, Kyoto (Japan), November 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistor Driven by Electronic Phase Transition,” NIP-RIKEN Joint Workshop, Manila (Philippine), November 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Phase Transitions at an Organic Field-Effect-Transistor Interface,” MRS-Thailand, Chiang Mai (Thailand), November 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Phase Transitions at an Organic Field-Effect-Transistor Interface,” NANOTEC-IMS Joint Workshop, Bangkok (Thailand), October 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Strongly-correlated electrons in 2D molecular interface,” CEMS Topical Meeting, Wako (Japan), July 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Novel organic field-effect-transistor with superconducting channel,” 2017 Korea-Japan Molecular Science Symposium, Busan (Korea), July 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistor Driven by Electronic Phase Transition,” M&BE9, Kanazawa (Japan), June 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistor with Superconducting Channel,” Okazaki-Strasbourg Symposium, Strasbourg (France), May 2017.

H. M. YAMAMOTO, “Superconducting transition at an organic field-effect-transistor interface,” WCSM-2017, Bangkok (Thailand), March 2017.

山本浩史, 「分子性固体中の強相関電子を用いた電界効果トランジスタ」, 分子アーキテクトニクス研究会, 松山, December 2017.

山本浩史,「電界誘起超伝導-絶縁体転移現象と理想FET」,電子情報通信学会(チュートリアルセッション),名古屋, March 2017.

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).

須田理行, 日本化学会進歩賞 (2017).

須田理行, 自然科学研究機構若手研究者賞 (2017).

須田理行, 分子科学研究奨励森野基金 (2017).

須田理行, 凝縮系科学賞 (2017).

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副代表 (2017-).

日本化学会東海支部常任幹事 (2015-2016).

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-).

学会の組織委員等

The 12th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (ISCOM2017) 事務局長 (2017).

アジア科学セミナー組織委員 (2014-2015).

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 (2014-2017).

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」, 2017年12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」, 2017年8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 (2017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。さらに今後は分子を用いたスピントロニクスデバイスについても開発を進める。

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) リレン化合物のフッ素化とオプトエレクトロニクスへの応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 芳香族化合物の完全フッ素化は、水素をフッ素に変換するシンプルな手法で、p型半導体をn型半導体に変換できる。これにより、分子量は大きく増加するが、融点、昇華温度、安定性などはあまり変化しない。また、ペンタセン ($C_{22}H_{14}$) とフッ素化ペンタセン ($C_{22}F_{14}$) のように、分子のサイズや対称性もよく似ている。このため、比較研究が容易で、高精度な光電子分光などを通じて、固体物性の深い理解に寄与している。本研究では、新たなターゲットとして、リレン化合物の完全フッ素化を目指している。リレン化合物は、ナフタレン ($C_{10}H_8$) をモノマーとし、1,8位と4,5位をつないでできたオリゴマーである。2量体のペリレン ($C_{20}H_{12}$)、3量体のターリレン ($C_{30}H_{16}$)、4量体のクォーターリレン ($C_{40}H_{20}$) が知られている。5量体 (ペンタリレン) 以上は、難溶性のため、可溶化のアルキル基が必要となる。8量体 (オクタリレン) まだが、誘導体として報告されている。最近、有機結晶中でのシングレットフィッション (SF, 一重項分裂) の有望な構造として、ターリレン、クォーターリレン、およびペンタリレンが理論研究者によって提案されている。SFは二つの分子間で、一つのシングレット (一重項) と一つの基底状態が、二つのトリプレット (三重項) に変換する過程である。トリプレットのエネルギーが、シングレットのエネルギーの半分以下であることが望ましい。このような条件を満たす分子は少なく、200%近いトリプレット量子収率を示すものは、テトラセン、ジフェニルイソベンゾフラン、カロテノイドなどに限られていた。2006年に、次世代の太陽電池として、このSFを利用すると効率が飛躍的に向上するという提案がなされた。これは、一つの光子から二つのキャリアが生まれるため、光電流が2倍になるという原理である。これ以降、SFのメカニズム解明と、トリプレット量子収率の高い色素の探求が始まった。前者は、特に、溶液中での分子内SFの研究が盛んである。最近では、テトラセンやペンタセンなどのアセン化合物の2量体、ペリレンやターリレンなどのリレン化合物の2量体が次々に合成され、200%近いトリプレット量子収率が報告されている。一つのシングレットから二つのトリプレットへ移行するときに、電荷移動状態 (CT) を経るルートと、直接のルートが理論的に提案されているが、両方の実験結果が出ており、議論が続いている。固体中での分子間SFとしては、最近、ターリレン誘導体の微結晶薄膜で200%近いトリプレット量子収率が報告されている。クォーターリレンに関しては、まだSFの報告はない。本研究では、リレン化合物 (nR : $n = 2, 3, 4, \dots$) を完全にフッ素化した PF_nR ($n = 2, 3, 4, \dots$) を合成し、SFの研究に供したい。DFT計算によると、平面の nR と異なり、 PF_nR はナフタレン環が25度ねじれている。このため、 PF_nR の溶解性は向上するものと考えられ、難溶性の nR より取り扱いやすいことが期待される。フッ素化ターリレン (PF_3R , $C_{30}F_{16}$) のLUMOの値は、 C_{60} のそれとほぼ同じであり、十分に電子注入が可能である。これらをn型半導体として、有機太陽電池の検討を行う。今年度は、ナフタレンモノマーを合成し、ペリレンの完全フッ素化に取り組んでいる。

B-1) 学術論文

Y. SAKAMOTO and T. SUZUKI, “Perfluorinated and Half-Fluorinated Rubrenes: Synthesis and Crystal Packing Arrangements,” *J. Org. Chem.* **82**, 8111–8116 (2017).

B-7) 学会および社会的活動

その他

出前授業「おもしろい形の分子を作る」岡崎市立東海中学校 (2017).

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

多大な貢献をしてくれた阪元助教が3月に退職し、グループの再立ち上げが急務となった。幸いなことに、榎山准教授がフッ素化リレン化合物の合成に興味をもってくれ、共同研究を行うこととなった。インターンシップの学生が積極的に取り組んでくれたおかげで、モノマー合成に関する多くの知見が得られた。榎山准教授と科研費や研究費公募に、代表者あるいは分担者として申請している。また、榎山グループが発見した特異な転位反応のメカニズムを、HPC システムズの本田氏と協力して、DFT 計算によって解明することができた。今後とも、榎山グループおよび所外の研究者との共同研究を通じて、グループの再構築に努めていきたいと思う。

6-7 メゾスコピック計測研究センター

繊細計測研究部門

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プラズモン物質の特性に関する研究への展開
- b) ナノ構造物質におけるキラリティと局所的な光学活性
- c) 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。各種形状貴金属ナノ構造体の分光及びダイナミクスの近接場分光イメージング計測を行い、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いだした。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。その展開の一つとして近接場円二色性イメージング装置を開発し、金属ナノ構造の局所光学活性の研究を行っている。
- b) キラルな構造を持つ金ナノ構造体（主に2次元構造）を電子線描画法で作製し、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すこと、また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、国内外の幾つかの研究グループ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。
- c) 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る。また光と物質のキラリティもその挙動に影響を及ぼすことが予想される。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

M. K. HOSSAIN, M. KITAJIMA, K. IMURA and H. OKAMOTO, “Interstitial-Dependent Enhanced Photoluminescence: A Near-Field Microscopy on Single Spheroid to Dimer, Tetramer, and Few Particles Gold Nanoassembly,” *J. Phys. Chem. C* **121**, 2344–2354 (2017).

H. MIZOBATA, K. UENO, H. MISAWA, H. OKAMOTO and K. IMURA, “Near-Field Spectroscopic Properties of Complementary Gold Nanostructures: Applicability of Babinet’s Principle in the Optical Region,” *Opt. Express* **25**, 5279–5289 (2017).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, “Generation of chiral optical near-fields with non-chiral metallic nanostructures and linearly polarized light,” *Proc. SPIE* **10252**, 1025214 (3 pages) (2017).

B-4) 招待講演

H. OKAMOTO, “Time- and Space-Domain Structures of Optical Fields on Metal Nanostructures,” JSPS-EPSC Symposium on Materials Science Pioneered by Structured Light, London (U.K.), January 2017.

成島哲也, 「近接場 CD ナノイメージングによる局所キラリティ観察」, 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, 神戸芸術センター, 神戸, 2017 年 1 月.

T. NARUSHIMA, “Circular Dichroism Imaging with Far- and Near-Field Detection,” Hiroshima International Workshop on Circular Dichroism Spectroscopy 2017, Hiroshima (Japan), February 2017.

岡本裕巳, 「金属ナノ構造における局所的な光のキラリティのイメージングと操作」, 第 64 回応用物理学会春季学術講演会, 横浜, 2017 年 3 月.

H. OKAMOTO, “Recent Developments in Plasmonics: Introduction,” 8th CSJ-RSC Joint Symposium, 97th Annual Meeting of The Chemical Society of Japan, Yokohama (Japan), March 2017.

H. OKAMOTO, “Local optical activity of nanomaterials (ナノ物質の局所的な光学活性),” 日本化学会第 97 春季年会特別企画「配位アシンメトリー：非対称な構造と空間の科学」, 横浜, 2017 年 3 月.

岡本裕巳, 「プラズモンの近接場光学イメージング：光場構造, 波束伝搬ダイナミクス, キラリティの実空間観察」, 新世代研究所界面ナノ科学研究会, 東京, 2017 年 3 月.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and Y. NISHIYAMA, “Local Optical Activity Imaging of Metal Nanostructures and Structured Chirality,” 2017 Korea-Japan Molecular Science Symposium “Frontiers in Molecular Science: Structure, Dynamics, and Function of Molecules and Complexes,” Busan (Korea), July 2017.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and Y. NISHIYAMA, “Imaging of Local Chirality with Near-Field Microscopy,” The 11th Asia-Pacific Conference on Near-field Optics (APNFO11), Tainan (Taiwan), July 2017.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and Y. NISHIYAMA, “Near-Field Imaging of Chiral Optical Fields on Plasmonic Materials,” The 8th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META’17), Incheon (Korea), July 2017.

成島哲也, 「ナノ構造物質の局所キラリティとその光学的・化学的応用展望」, 2017 年真空・表面科学合同講演会, 葉山, 2017 年 8 月.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, Y. NISHIYAMA and T. NARUSHIMA, “Imaging Chiral Plasmons,” JSAP-OSA Joint Symposia, The 78th JSAP Autumn Meeting 2017, Fukuoka (Japan), September 2017.

T. NARUSHIMA, “Microscopic Study on Optical Activity Localized in Materials to Explore Hierarchical Chirality in Various Scales,” The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8), Tsukuba (Japan), October 2017.

S. HASHIYADA, “Visualization of Chiral Light Confined in Nano Space,” IMS Symposium “Cutting-Edge Researches in Coordination Chemistry and Photochemistry,” Okazaki (Japan), November 2017.

B-5) 特許出願

特願 2016-226414, 「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), 2016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).

4th Optical Manipulation Conference, Optics & Photonics International Congress 2017, Program 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 (2013–2017).

日本学術会議連携会員 (2017–).

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

関西学院大学大学院理工学研究科,「化学特殊講義XI」, 2017年9月11日-12日.

B-10) 競争的資金

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).

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).

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-2017年).

科学技術振興機構さきかけ研究,「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-2017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-2017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-).

科研費基盤研究(B),「階層を越えた物質のキラリティの3次元分析:汎用偏光二色性分光分析イメージング」, 成島哲也 (2017年-).

科研費研究活動スタート支援,「対称金属ナノ構造体と直線偏光を用いた不斉分子の高感度検出」, 橋谷田俊 (2017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,分子研着任当初の数年間では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いた。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,多くの追従研究を生んだと考えている。その後研究を次のフェーズに進め,時間分解近接場分光では,10fs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。その更なる展開のアイデアもあるが,非常に高度な技術を要する実験であり,困難が大きい。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,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。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。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、国内外との共同研究も開始している。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。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。昨年度に関連する新学術領域研究が発足したことを契機に、光圧(勾配力、散乱力)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。

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リニクスの展開

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リニクス [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，新たなフォトリ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 μ m)，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 μ m 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リニクスで実証した。アト秒発生に重要な中赤外 OPCPA では，LA-PPMgLN を用い波長 2.1 μ m にてパルス幅 15 fs を平均出力 10 W と，この領域で世界最大出力を達成した。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ある。また、LA-PPMgLNを用いてピコ秒領域で400 μJ に至る狭線幅THz波発生も可能となった。マンレー・ローによる量子限界を超える効率である。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

R. DIAO, Z. LIU, F. NIU, A. WANG, T. TAIRA and Z. ZHANG, “Compressed 6ps Pulse in Nonlinear Amplification of a Q-Switched Microchip Laser,” *Laser Phys.* **27**, 025102 (4 pages) (2016).

Y. SATO and T. TAIRA, “Model for the Polarization Dependence of the Saturable Absorption in Cr^{4+} :YAG,” *Opt. Mater. Express* **7**, 577–586 (2017).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Quasi Phase-Matched Quartz for Intense-Laser Pumped Wavelength Conversion,” *Opt. Express* **25**, 2369–2376 (2017).

H. H. LIM and T. TAIRA, “Sub-Nanosecond Laser Induced Air-Breakdown with Giant-Pulse Duration Tuned Nd:YAG Ceramic Micro-Laser by Cavity-Length Control,” *Opt. Express* **25**, 6302–6310 (2017).

A. KAUSAS, P. LOISEAU, G. AKA, Y. ZHENG, L. ZHENG and T. TAIRA, “Temperature Table Operation of YCOB Crystal for Giant-Pulse Green Microlaser,” *Opt. Express* **25**, 6431–6439 (2017).

F. AHR, S. W. JOLLY, N. H. MATLIS, S. CARBAJO, T. KROH, K. RAVI, D. N. SCHIMRF, J. SCHULTE, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, A. R. MAIER and F. X. KARTNER, “Narrowband Terahertz Generation with Chirped-and-Delayed Laser Pulses in Periodically Poled Lithium Niobate,” *Opt. Lett.* **42**, 2118–2121 (2017).

L. ZHENG, A. KAUSAS and T. TAIRA, “Drastic Thermal Effects Reduction Through Distributed Face Cooling in a High Power Giant-Pulse Tiny Laser,” *Opt. Mater. Express* **7**, 3214–3221 (2017).

C. CANALIAS, S. MIROV, T. TAIRA and B. BOULANGER, “Feature Issue Introduction: Shaping and Patterning Crystals for Optics,” *Opt. Mater. Express* **7**, 3466–3470 (2017).

Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA, “Process Design of Microdomains with Quantum Mechanics for Giant Pulse Lasers,” *Sci. Rep.* **7**, 10732 (11 pages) (2017).

K. NAWATA, S. HAYASHI, H. ISHIZUKI, K. MURATE, K. IMAYAMA, Y. TAKIDA, V. YAHIA, T. TAIRA, K. KAWASE and H. MINAMIDE, “Effective Terahertz Wave Parametric Generation Depending on the Pump Pulse Width Using a LiNbO_3 Crystal,” *IEEE Trans. Terahertz Sci. Tech.* **7**, 617–620 (2017).

R. MORIMOTO, T. GOTO, T. TAIRA, J. PRITCHARD, M. MINA, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, H. UCHIDA and M. INOUE, “Randomly Polarised Beam Produced by Magnetooptically Q-Switched Laser,” *Sci. Rep.* **7**, 15398 (6 pages) (2017).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

A. KAUSAS, L. ZHENG, V. YAHIA and T. TAIRA, “Structured Laser Gain-Medium by New Bonding for Power Micro-Laser,” *LASE, SPIE Photonics West 2017*, 10082-34 (2017).

V. YAHIA and T. TAIRA, “Compact Microchip-Seeded Multistage MOPA System for Laser Induced Breakdown Applications,” *Laser Display and Lighting Conference (LDC'17), OPIC'17*, LDC7-4 (2017).

- Y. SATO and T. TAIRA**, “Model for the Polarization Dependence of Saturable Absorption in Single-Crystalline Cr⁴⁺:YAG,” *Laser Display and Lighting Conference (LDC'17), OPIC'17, ALPSp14-12* (2017).
- N. BIGLER, C. R. PHILLIPS, J. PUPEIKIS, L. GALLMANN, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and U. KELLER**, “High-Power Optical Parametric Chirped-Pulse Amplifier Operating at 2.2 μm,” *CLEO 2017*, SM3I.2 (2017).
- T. IKEO, K. HAGITA, Y. ISHIKAWA, Y. HIGASHI, N. JIKUTANI, T. TAIRA and T. SUZUDO**, “Improvement the Optical-to-Optical Conversion Efficiency of Passively Q-Switched Micro-Laser Pumped by VCSEL Module,” *The 5th Laser Ignition Conference (LIC'17)*, LWA2.2 (2017).
- V. YAHIA and T. TAIRA**, “Multistage Amplification of Microchip Laser for Air Breakdown Experiments,” *The 5th Laser Ignition Conference (LIC'17)*, LWA2.3 (2017).
- H. LIM and T. TAIRA**, “Pulse-Width Scaling Law of Air-Breakdown for Laser Ignition Application,” *The 5th Laser Ignition Conference (LIC'17)*, LWA3.2 (2017).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Model for the Polarization Dependence of Saturable Absorption Characteristics in Cr⁴⁺:YAG,” *The 5th Laser Ignition Conference (LIC'17)*, LWA3.3 (2017).
- R. MORIMOTO, T. GOTO, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, T. TAIRA, H. UCHIDA and M. INOUE**, “Epitaxially Grown Magnetic Garnet Film on Nd:YAG Substrate for Microchip Lasers,” *The 5th Laser Ignition Conference (LIC'17)*, LWA5.6 (2017).
- N. BIGLER, C. R. PHILLIPS, J. PUPEIKIS, L. GALLMANN, H. ISHIZUKI, T. TAIRA and U. KELLER**, “Ultra-Broadband Optical Parametric Chirped-Pulse Amplifier Generating 9.1 W at 2.2 μm,” *CLEO/Europe-EQEC 2017*, CF-4.2 (2017).
- H. LIM and T. TAIRA**, “Pulse-Width and Pulse-Energy Dependence of Sub-Nanosecond Laser Induced Air-Breakdown,” *CLEO/Europe-EQEC 2017*, CM-P.22 (2017).
- R. BHANDARI, N. ISHIGAKI, S. UNO, T. HIROKI, J. SAIKAWA, K. TOJO and T. TAIRA**, “Novel End-Pumping Method for Stable and Compact Microchip Laser,” *CLEO/Europe-EQEC 2017*, CA-P.34 (2017).
- A. KAUSAS, E. LAFITTE-HOUSSAT, P. LOISEAU, G. AKA, Y. ZHENG, L. ZHENG, V. YAHIA and T. TAIRA**, “Study of Giant-Pulse Microlaser Based on Type I SHG in YCOB Crystal,” *The 24th Congress of the International Commission for Optics (ICO-24)*, M1E-02 (2017).
- L. ZHENG and T. TAIRA**, “kHz Repetition Rate Giant-Pulse Green Laser from DFC-Microlaser,” *The 24th Congress of the International Commission for Optics (ICO-24)*, M1E-04 (2017).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Damage Threshold Evaluation by Bulk-Shaped Nonlinear and Laser Materials,” *The 24th Congress of the International Commission for Optics (ICO-24)*, Tu1D-06 (2017).
- R. MORIMOTO, T. GOTO, H. TAKAGI, Y. NAKAMURA, H. UCHIDA, T. TAIRA and M. INOUE**, “Epitaxial Growth of Ce Substituted Yttrium iron Garnet Film on Nd:YAG Substrate,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JM5A.8 (2017).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Study of Saturable Absorption in Cr⁴⁺:YAG Ceramics for the Efficient Q-Switched Laser Action,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JTu2A.19 (2017).
- H. LIM and T. TAIRA**, “Giant-Pulse Width Tunable Nd:YAG Ceramic Microchip Laser and Smplifier for Dmart Ignition,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JTu2A.42 (2017).

V. YAHIA, L. ZHENG and T. TAIRA, “>200 mJ High-Brightness Dub-ns Micro-Laser-Based Vcompact MOPA,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, AT1A.5 (2017).

L. ZHENG and T. TAIRA, “High Damage-Resistant Coating Solution for High-Field Ceramics Laser,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JTh2A.3 (2017).

H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Laser Damage Threshold Evaluation of Nonlinear Crystal Quartz for Sub-Nanosecond Pulse Irradiation,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JTh2A.12 (2017).

A. KAUSAS, L. ZHENG and T. TAIRA, “CW Operation of Distributed Face Cooling Chip for Tiny Integrated Lasers,” *OSA Topical Meeting on Advanced Solid-State Lasers (ASSL)*, JTh2A.17 (2017).

B-3) 総説, 著書

L. ZHENG and T. TAIRA, “Over 0.5 MW Green Laser from Sub-Nanosecond Giant Pulsed Microchip Laser,” *Proc. of SPIE* **9730**, 97301A (4 pages) (2016).

Y. SATO and T. TAIRA, “Numerical Model for Thermal Parameters in Optical Materials,” *Proc. of SPIE* **9893**, 98930F (6 pages) (2016).

Y. JEONG, C. KRANKEL, A. GALVANAUSKAS, K. SCHEPLER, T. TAIRA and S. JIANG, “Focus Issue Introduction: Advanced Solid-State Lasers (ASSL) 2016,” *Opt. Express* **25**, 8604–8610 (2017). (Opening Article)

A. KAUSAS, L. ZHENG and T. TAIRA, “Structured Laser Gain-Medium by New Bonding for Power Micro-Laser,” *Proc. of SPIE* **10082**, 100820Z (4 pages) (2017).

平等拓範, 「革新的レーザー点火システムの開発」, *日本燃焼学会誌* **59**, 157–163 (2017).

軸谷直人, 泉谷一磨, 沼田雅之, 大倉佑介, 原田慎一, 新井伸幸, 池田圭介, 佐々木謙, 萩田健太郎, 池應敏行, 常包正樹, 平等拓範, 鈴木 剛, 「レーザー点火向け高出力 VCSEL モジュール」, *日本燃焼学会誌* **59**, 164–171 (2017).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

平等拓範, 「ジャイアント・マイクロフォトンクスによる超小型パルスレーザーの開発」, レーザー学会学術講演会第 37 回年次大会, 徳島, 2017 年 1 月.

平等拓範, 「超小型高輝度レーザーの最新動向」, 日亜化学工業(株), 徳島, 2017 年 1 月.

平等拓範, 「国際会議報告 Photonics West 2017 報告」, 光産業技術振興協会, 第 4 回光材料・応用技術研究会, 東京, 2017 年 3 月.

後藤太一, 森本凌平, プリチャード ジョン, 高木宏幸, 中村雄一, リム パンボイ, 田裕久, ミナ マニ, 平等拓範, 井上光輝, 「磁気ドメインを利用した薄膜 Q スイッチレーザーの開発」, 第 64 回応用物理学会春季学術講演会(講演奨励賞受賞記念講演), 横浜, 2017 年 3 月.

平等拓範, 「ジャイアントマイクロフォトンクスによるユビキタス・パワーレーザー」, 第 64 回応用物理学会春季学術講演会, 横浜, 2017 年 3 月.

平等拓範, 「ジャイアントパルスレーザーの可能性」, 科学技術交流財団第 8 回「レーザー利用革新的材料開発研究会」, 名古屋市, 2017 年 3 月.

平等拓範, 「LD 励起パワーレーザー」, 光・量子ビーム科学合同シンポジウム 2017, 大阪, 2017 年 5 月.

T. TAIRA and H. ISHIZUKI, “Large Aperture Quasi-Phase Matched Nonlinear Material for Functional Power Lasers,” *CLEO 2017*, San Jose (U.S.A.), May 2017.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Ubiquitous Power Lasers,” The 18th International Symposium on Laser Precision Microfabrication (LPM), Toyama (Japan), June 2017.* (Plenary Talk)

T. TAIRA, “Ubiquitous Power Lasers from Giant Micro-Photonics,” Sigma-Tech Days 2017, Limoges (France), June 2017.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics Toward Innovative Ignition,” The 5th Laser Ignition Conference (LIC’17), Bucharest (Romania), June 2017.

平等拓範, 「1.5 μ 帯アイセーフジャイアントパルスマイクロチップレーザー」, 月刊オプトロニクス特集連動セミナー, 東京, 2017年7月.

F. X. KAERTNER, K. RAVI, S. W. JOLLY, F. AHR, D. ZHANG, X. WU, M. FAKHARI, H. CANKAYA, A.-L. CALENDRON C. ZHOU, F. LEMERY, W. QIAO, R. W. HUANG, S. CARBAJO, D. N. SCHIMPF, A. R. MAIER, M. HEMMER, L. ZAPATA, O. D. MUECKE, G. CIRMI, A. FALLAHI, N. H. MATLIS, H. ISHIZUKI and T. TAIRA, “Terahertz Accelerator Technology,” Nonlinear Optics (NLO), Hawaii (U.S.A.), July 2017.

平等拓範, 「マイクロチップレーザーの開発」, ImPACT プログラム「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」第3回シンポジウム, 東京, 2017年7月.

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Integrated Power Laser,” 5th IAPLE Annual Conference (IAPLE 2017), Kos (Greece), July–August 2017.* (*Plenary Keynote*)

平等拓範, 「マイクロチップレーザーの特徴と応用」, 公益財団法人浜松地域イノベーション推進機構フォトンバレーセンター, 光産業創成大学院大学, 公益財団法人浜松地域イノベーション推進機構フォトンバレーセンター委託事業平成29年度第1回光を利用したものづくりに関するセミナー, 浜松, 2017年8月.

平等拓範, 「国際会議CLEO2017報告」, 光産業技術振興協会第2回光材料・応用技術研究会, 東京, 2017年9月.

T. TAIRA, “Ubiquitous Power Lasers from Giant Micro-Photonics,” International Conference on Laser Ablation (COLA 2017), Marseille (France), September 2017.

平等拓範, 「マイクロドメイン制御によるジャイアントパルス小型レーザー」, 第30回日本セラミックス協会秋季シンポジウム, 神戸, 2017年9月.

平等拓範, 「マイクロチップレーザー」, 第88回レーザー加工学会講演会, 大阪大学, 大阪, 2017年10月.

Y. SATO and T. TAIRA, “Design of Quantum States in Micro domains for Giant Pulse Lasers,” The 7th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (CGCT-7), Changchun (China), October 2017.

平等拓範, 「Advanced Solid State Lasers 2017国際会議報告」, 光産業技術振興協会, 第3回光材料・応用技術研究会, 宝塚ホテル, 宝塚, 2017年11月.

平等拓範, 「カーフォトンクスの未来～エンジン点火, LIDAR からレーザー加工まで」, 光とレーザーの科学技術フェア 2017「レーザー科学技術フェア」, (株)オプトロニクス社, 科学技術館, 東京, 2017年11月.

B-5) 特許出願

特願 2017-085731, 「レーザー点火装置」, 平等拓範, 林 桓弘(自然科学研究機構), 2017年.

特願 2017-186416, 「接合装置および接合方法」, 平等拓範, 近藤聖彦(自然科学研究機構), 2017年.

B-6) 受賞, 表彰

齋川次郎, 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).

平等拓範, (公財)レーザー技術総合研究所泰山賞レーザー進歩賞 (2017).

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ー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).

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 (EPE11) 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).

日本学術振興会接合界面創成技術第 191 委員会委員 (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).

2016 Advanced Solid State Lasers (ASSL), Joint Feature Issue in *Opt. Express* and *Opt. Mater. Express*, ゲスト編集委員 (2017).

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

豊橋技術科学大学, 客員教授, 2016年–.

B-10) 競争的資金

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ーの研究開発」, 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, 「車載型マイクロレー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」, 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」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 (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ニクスによる次世代レーザ点火・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).

科学技術振興機構CREST 研究, 「ホログラム光刺激による神経回路再編の人為的創出」, 再委託(研究代表神戸大学和氣弘明), 平等拓範 (2017年-2022年).

科学技術振興機構未来社会創造事業(大規模プロジェクト型) 「レーザ駆動による量子ビーム加速器の開発と実証」, 再委託(研究代表公益財団法人高輝度光科学研究センター熊谷教孝), 平等拓範 (2017年-2026年).

B-11) 産学連携

(株)コンボン研究所, 「マイクロ固体フォトニクスの基礎研究」, 平等拓範 (2017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 (2017年).

C) 研究活動の課題と展望

先端的レーザ光源の中で, 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ニクスは, 医療, バイオ, エネルギー, 環境, ディスプレー, 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。

広帯域相関計測解析研究部門

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，多くの分子振動単位と共鳴しており，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用いた超高速ポンプ・プローブ分光が挙げられる。800 nm のフェムト秒パルスで半導体を励起し，生成したキャリアのダイナミクスを，広帯域な赤外スペクトル計測を行うことで，観測した。台湾のグループとの共同研究によって，詳細な解析を進め，100 ps 程度の高速な緩和は，オージェ再結合であることと，その後，ナノ秒のタイムスケールで拡散による緩和が起こることがわかった。
- 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使って，電場波形に敏感な高次高調波発生の研究を進めた。Si 薄膜にサブサイクル中赤外光パルスを集光すると，300 nm 以下の紫外領域まで広がった高次高調波が発生した。サブサイクル中赤外光パルスの位相を操作することで，高調波スペクトルが大きく変化した。この変化は，光学ブロッホ方程式でおおむね説明できることがわかった。
- c) 前年度にはチャープパルス増幅を基本としたツリウム添加 ZBLAN ファイバー増幅器によって，2 μm の波長で出力が 4 W 程度，時間幅が 150 フェムト秒のパルスが得られた。このパルス幅をさらに短くするために，ファイバー内の非線形効果を利用する増幅を試みた。すなわち，チャープパルス増幅法で用いるパルス伸長器を取り除き，パルス幅を伸ばしていない状態で増幅を行った。その結果，ファイバー内での光強度の尖頭値が格段に高くなり，非線形効果によってスペクトル幅が大幅に広がった。この時に得られたパルスは，圧縮器を通していないにも関わらず時間幅は 48 フェムト秒となっており，前年度の 1/3 にまで短縮することに成功した。出力は 2.4 W となっており，チャープパルス増幅の場合と比べて，遜色のないものとなっている。

B-1) 学術論文

T.-T. YEH, H. SHIRAI, C.-M. TU, T. FUJI, T. KOBAYASHI, and C.-W. LUO, "Ultrafast Carrier Dynamics in Ge by Ultra-Broadband Mid-Infrared Probe Spectroscopy," *Sci. Rep.* **7**, 40492 (10 pages) (2017).

Y. NOMURA and T. FUJI, "Efficient Chirped-Pulse Amplification Based on Thulium-Doped ZBLAN Fibers," *Appl. Phys. Express* **10**, 012703 (4 pages) (2017).

Y. NOMURA and T. FUJI, "Generation of Watt-Class, Sub-50 fs Pulses through Nonlinear Spectral Broadening within a Thulium-Doped Fiber Amplifier," *Opt. Express* **25**, 13691–13696 (2017).

H. SHIRAI, Y. NOMURA and T. FUJI, “Self-Referenced Measurement of Light Waves,” *Laser Photon. Rev.* **11**, 1600244 (6 pages) (2017).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. NOMURA and T. FUJI, “Ultrafast thulium-doped amplifier generating watt-level 50 femtosecond pulses,” *The 6th Advanced Lasers and Photon Sources*, ALPS7-2 (2017).

Y. NOMURA and T. FUJI, “Watt-level 50 fs pulse generation from thulium-doped ZBLAN fiber amplifier system,” *CLEO/Europe-EQEC 2017*, CF-3.4 (2017).

H. SHIRAI, Y. FURUTANI and T. FUJI, “Ultra-broadband mid-infrared spectroscopy for real-time observation of chemical reaction dynamics,” *ICO24*, M1B-05 (2017).

T. FUJI, M. SUZUKI, P. MALEVICH, Y. NOMURA, N. TSURUMACHI and A. BALTUSKA, “Generation of mid-infrared supercontinuum in cascaded fluoride and chalcogenide glass fibers pumped with Thulium based master oscillator power amplifier,” *ICO24*, M1G-04 (2017).

H. SHIRAI, F. KUMAKI, Y. NOMURA and T. FUJI, “High-harmonic generation driven by single-cycle mid-infrared pulses in solids,” *Ultrafast Optics XI*, Mo1.4 (2017).

T. FUJI, M. SUZUKI, P. MALEVICH, Y. NOMURA, N. TSURUMACHI and A. BALTUSKA, “Generation of mid-infrared supercontinuum in cascaded fluoride and chalcogenide glass fibers pumped with Tm-based femtosecond amplifier,” *Ultrafast Optics XI*, Tu6.3 (2017).

Y. NOMURA and T. FUJI, “Ultrafast thulium-doped ZBLAN fiber amplifier utilizing nonlinear spectral broadening,” *Advanced Solid State Lasers*, JTh2A.47 (2017).

B-3) 総説, 著書

H. SHIRAI, Y. NOMURA and T. FUJI, “Development and Application of Sub-Cycle Mid-Infrared Source Based on Laser Filamentation,” *Appl. Sci.* **7**, 857 (5 pages) (2017).

B-4) 招待講演

藤 貴夫, 「新規フェムト秒赤外パルスレーザーを光源とした計測装置」, 分子観察による生命の階層横断的な理解, 分子科学研究所, 岡崎, 2017年3月.

野村雄高, 藤 貴夫, 「トリウム添加ZBLANファイバーによる2 μm帯超短パルスレーザーシステム」, 超高速光エレクトロニクス研究会, 電子情報通信学会超高速光エレクトロニクス時限研究専門委員会, 名古屋大学, 名古屋, 2017年6月.

藤 貴夫, 「超短光パルスの測定法——基礎から最先端の研究まで——」, 第62回物性若手夏の学校, 長良川温泉ホテルパーク, 岐阜, 2017年7月.

T. FUJI, H. SHIRAI and Y. NOMURA, “Self-referenced light wave measurement of few-cycle mid-infrared pulses,” *CLEO Pacific Rim Conference*, Singapore, August 2017.

T. FUJI, H. SHIRAI and Y. NOMURA, “Self-referenced waveform measurement of ultrashort mid-infrared pulses,” *ALT'17*, Busan (Korea), September 2017.

藤 貴夫,「チャープパルス上方変換による高速な中赤外スペクトル計測」,テラヘルツ波科学技術と産業開拓第182委員会第33回研究会,浜松ホトニクス,浜松,2017年10月.

野村雄高,「新奇な長波長レーザーによる超深部顕微分光システム」,光電相互変換第25委員会第239回研究会,明治大学,東京,2017年12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

学協会役員等

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)

電子情報通信学会超高速光エレクトロニクス時限研究専門委員会第4部会副査(2017-).

電子情報通信学会超高速光エレクトロニクス時限研究専門委員会第2部会副査(2017-). (野村雄高)

学会の組織委員等

CLEO/Europe 2007国際会議プログラム委員(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(2009).

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(2012).

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(2013).

HILAS 国際会議プログラム委員(2014).

CLEO/USA2014国際会議プログラム委員(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(2014-2015).

レーザー学会学術講演会第38回年次大会プログラム委員(2017). (野村雄高)

ICO24国際会議プログラム委員,座長(2017).

CLEO Pacific Rim 2017座長(2017).

Ultrafast Optics 2017国際会議プログラム委員,座長(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・学術審議会量子科学技術委員会・超短パルスレーザーに係るロードマップ検討グループ専門有識者(2017-).

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, 学融合レクチャー「先端レーザー基礎演習」, 2017年9月19日-9月21日, 2017年10月24日-10月26日.

B-10) 競争的資金

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, 「ト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 μm 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かけ研究「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).

科研費基盤研究(B), 「光電場波形計測法の開発と新しい非線形光学の開拓」, 藤 貴夫 (2017年-2020年).

科学技術振興機構CREST研究, 「超短赤外パルス光源を用いた顕微イメージング装置の開発と生命科学への応用」, 藤 貴夫 (2017年-2023年).

C) 研究活動の課題と展望

ファイブレ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る。この光源を使った新規分光法が評価され, CRESTのプロジェクトに採択された。この手法をさらに発展させて, 分子科学のみならず, 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有効に用いて, 高次の非線形過程の光電場位相による制御が可能であることを示した。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。ファイバーレーザーの開発では, 非線形ファイバー増幅器の開発に成功した。この増幅器から発生するスペクトルは2000 nmから1800 nm以下まで広がっており, 3光子顕微鏡において, 最適な波長であると考えられる。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。