

## 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)  $\alpha$ ヘリカルタンパク質構造のゼロからのデザイン；複数の $\alpha$ ヘリックスが集まった $\alpha$ 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、 $\alpha$ 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 $\alpha$ 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 $\alpha$ 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 $\alpha$ 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 $\alpha$ 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F<sub>1</sub>-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,” 8<sup>th</sup> 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,” 5<sup>th</sup> 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,” 6<sup>th</sup> International Conference on New Frontiers in Physics (ICNFP 2017), Kolybari, 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,” 19<sup>th</sup> SPVM National Physics Conference, University of San Carlos, Cebu (Philippines), October 2017.

**Y. SHIKANO**, “Patter Formation in Reaction-Diffusive Vicsek Model,” 5<sup>th</sup> International Complex Systems Meeting in 19<sup>th</sup> 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,” 3<sup>rd</sup> 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<sup>-</sup> 導電性酸水素化物の物質探索
- b) H<sup>-</sup> 導電性酸水素化物のイオン導電機構解析
- c) H<sup>-</sup> 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<sup>-</sup> 導電体の物質探索が進展し, 新たに Ba<sub>2</sub>LiH<sub>3-2x</sub>O<sub>1+x</sub> と Ba<sub>2</sub>MHO<sub>3</sub> (M = Sc, Y) の合成に成功した。Ba<sub>2</sub>LiH<sub>3-2x</sub>O<sub>1+x</sub> は, 300 °C で 10<sup>-2</sup> S·cm<sup>-1</sup> を越える極めて高い H<sup>-</sup> 導電特性を示した。一方, Ba<sub>2</sub>MHO<sub>3</sub> (M = Sc, Y) は, これまで報告された酸水素化物とは異なる H<sup>-</sup> 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<sub>2-x-y</sub>Sr<sub>x+y</sub>LiH<sub>1+x+y</sub>O<sub>3-y</sub> 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, H<sub>2</sub> + 2e<sup>-</sup> ⇌ 2H<sup>-</sup> 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<sup>-</sup> 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<sup>-</sup> Conductivity of LaSrLiH<sub>2</sub>O<sub>2</sub>,” *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,” 3<sup>rd</sup> 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<sup>-</sup> 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<sup>-</sup> Conductivity of Ba-Li oxyhydride,” IUMRS-ICAM 2017 15<sup>th</sup> 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<sup>-</sup> conductivity in La-Sr-Li oxyhydride system,” 21<sup>st</sup> International Conference on Solid State Ionics, Padua (Italy), June 2017.

**G. KOBAYASHI**, “Study on H<sup>-</sup> Conductive Oxyhydrides for Next-Generation Battery Systems,” 21<sup>st</sup> 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,” 8<sup>th</sup> 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<sup>-</sup> 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<sup>-</sup> 導電性酸水素化物の物質探索については, Ba<sub>2</sub>LiH<sub>3-2x</sub>O<sub>1+x</sub> の合成に成功したことで大きく進展した。Ba<sub>2</sub>LiH<sub>3-2x</sub>O<sub>1+x</sub> が 300–400 °C で示す H<sup>-</sup> 導電特性 ( $\sigma \geq 10^{-2} \text{ S cm}^{-1}$ ) は, プロトン (H<sup>+</sup>) 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<sup>+</sup>) 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<sup>+</sup> 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<sup>-</sup> 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<sup>-</sup> のイオン導電機構を明らかにしたい。

H<sup>-</sup> 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<sup>+</sup> 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<sup>-</sup> 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<sup>-</sup> 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  $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>X (X = Cl, Br) の薄膜単結晶を用いたFETを作製し、その電気的特性を測定した。モット絶縁体中では電子間に働くクーロン反発と格子整合のために本来金属的であるべきキャリアの伝導性が極端に低い状態が実現しているが、トランジスタのゲート電界により静電キャリアドーピングが行われると実効的なクーロン反発が遮蔽されて金属的な伝導性が復活する。こうした原理による伝導性スイッチングはこれまでの半導体デバイスではほとんど使われてこなかったが、我々のグループが世界に先駆けて原理検証したものである。本年は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、 $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu(NCS)<sub>2</sub>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、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub>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の中を貫通する伝導性ナノワイヤーとからなる複合構造を形成した。こうしたナノワイヤーは結晶構造の中で三次元的に周期配列しているため、結晶の並進対称性を使った配線材料として利用できる可能性がある。そのため、現在このようなナノワイヤーの物性評価と配列様式を改良するための研究を行っている。

B-1) 学術論文

**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 12<sup>th</sup> 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), 「 $\pi$ 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。