

6. 研究活動の現状

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
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
2017.9. ～ 2018.8.	2018	178	52

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) 凝縮系反応に関する理論研究：酵素反応における構造励起状態と非平衡的高速遷移
- b) 凝縮系反応に関する理論研究：不均一・動的に揺らぐ構造変化・反応の一分子解析
- c) 生体分子系の機能発現に関する理論研究：時計タンパク質 KaiC における概日リズム
- d) 生体分子系の機能発現に関する理論研究：FMO タンパク質における励起エネルギー移動
- e) 熱的物性発現・ガラス転移に関する理論研究：水のガラス転移温度，Kauzmann 温度

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 酵素反応は高い触媒活性と選択性を示す。酵素反応を凝縮系反応の一例として考え，cis-trans 異性化を例に如何に動力学が酵素反応に関わっているかについて解析を行っている。我々は，遷移状態と始状態と終状態を繋ぐ反応性軌道により反応動力学を解析し，始状態の平衡分布では見出すことのできない構造励起状態を経て非熱平衡かつ高速に反応が進行することを明らかにした。本解析で明らかになった動的特徴は，過冷却液体など稀に起こる変化に見られる構造変化を想起させるものであり，解析を行ったタンパク質に限定されるものではなく，酵素反応の一般的特徴と考えられる。
- b) 化学反応に関する研究として，一分子速度論の観点から凝縮系の構造変化や化学反応における不均一かつ動的な揺らぎについても解析を進めている。とくに，確率過程論に基づき系の動的情報の解析手法を開発するとともに，その手法および超長時間の分子動力学計算のデータに基づき水溶液中の BPTI タンパク質の構造変化動力学を解析を行っている。また，この研究に関連し，ポリセオナミド B (pTB) におけるイオン透過機構の解明に向け，pTB のポテンシャルパラメータを決定し，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，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。近年，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や素反応およびタンパク質の構造変化を考慮した数値モデルによる概日リズムの解析などを進めている。
- d) 生体分子系の機能発現の解析として，励起エネルギー移動 (EET) の解析も行っている。光合成系では，吸収された光エネルギーが EET により効率よく活性中心へと伝達される。様々な実験にも関わらず，単純なタンパク質系においてもその高効率 EET の分子機構は明らかになっていない。我々は，高効率かつ高精度で基底・励起状態の動力学計算手法を開発し，Fenna-Matthews-Olson (FMO) タンパク質を例に EET の解析を行った。その結果，複数の緩和経路上のいくつかの色素分子が異なる物理起源により大きく揺らぐことにより，頑強かつ高速な EET が実現していることが明らかになってきた。

- e) 水を例に熱力学的性質の動的起源について解析を進めている。常温付近で見られる様々な熱力学異常性は融点以下でより顕著となり、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。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・動力学的な系統的な解析を行い、室温状態で支配的な局所的高密度状態が190 K以下で不安定化しスピノダル分解的挙動により、構造・動的転移が起こることを解明した。さらに、低温においても構造変化を引き起こす特定の水素結合欠陥および水の低いガラス転移温度の物理的起源も明らかにした。

B-1) 学術論文

K. SHIRAGA, K. TANAKA, T. ARIKAWA, S. SAITO and Y. OGAWA, “Reconsideration of the Relaxational and Vibrational Line Shapes of Liquid Water Based on Ultrabroadband Dielectric Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 26200–2609 (2018). (Selected as 2018 PCCP HOT Articles)

S. SAITO, B. BAGCHI and I. OHMINE, “Crucial Role of Fragmented and Isolated Defects in Persistent Relaxation of Deeply Supercooled Water,” *J. Chem. Phys.* **149**, 124504 (8 pages) (2018).

M. OKUDA, M. HIGASHI, K. OHTA, S. SAITO and K. TOMINAGA, “Theoretical Investigation on Vibrational Frequency Fluctuations of SCN-Derivatized Vibrational Probe Molecule in Water,” *Chem. Phys.* **512**, 82–87 (2018).

M. KALATHINGAL, T. SUMIKAMA, T. MORI, S. OIKI and S. SAITO, “Structure and Dynamics of Solvent Molecules inside Polytheonamide B Channel in Different Environments: A Molecular Dynamics Study,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 3334–3348 (2018).

P. PONGPRAYOON and T. MORI, “Critical Role of Dimer Formation in Monosaccharide Binding to Human Serum Albumin,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 3249–3257 (2018).

B-4) 招待講演

S. SAITO, “Supercooled water: Structure, dynamics, thermodynamics, and glass transition,” Symposium on Spectroscopic and computational studies of complex chemical systems at different time and length scales, Indian Institute of Technology Kanpur, Kanpur (India), December 2018.

S. SAITO, “Supercooled water: Structure, dynamics, thermodynamics, and glass transition,” Conference on Local Structure and Dynamics of Hydrogen Bonds in Water: Supercooled Water and Binary Mixture, Indian Institute of Science, Bangalore (India), December 2018.

T. MORI, “Hierarchy and heterogeneity in protein folding and enzyme catalysis,” 2nd workshop on Advances in Theory and Computation of Complex Systems—Biological Systems, Nanjing (China), December 2018.

S. SAITO, “Excitation energy transfer in photosynthetic protein FMO,” Japan-Indo Seminar on Frontiers in Molecular Spectroscopy: From Fundamentals to Applications in Chemistry and Biology, Kobe University, Kobe (Japan), October–November 2018.

S. SAITO, “Supercooled water: Structure, dynamics, and glass transition,” Energy Landscape 2018, Kalamata (Greece), September 2018.

S. SAITO, “Supercooled water: Structure and dynamics,” 1st UJN-SKKU-IMS Symposium on Chemistry and Materials, University of Jinan, Jinan (China), August 2018.

S. SAITO, “Supercooled water: Structure, dynamics, and Kauzmann temperature,” 7th JCS Symposium, Czech Academy of Sciences, Prague (Czech), May 2018.

S. KODA and S. SAITO, “Circadian rhythm of Kai system: A reaction model considering reactions and conformational changes,” BK21plus Symposium, Chungbuk National University, Cheongju (Korea), May 2018.

甲田信一, 齊藤真司, 「時計タンパク質 KaiABC に関する反応モデル構築および素過程の協奏関係の理論的推定」, 第 77 回尾張コンプレックスセミナー, 名古屋, 2018 年 2 月.

B-6) 受賞, 表彰

森 俊文, 分子科学会奨励賞 (2018).

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–).

分子科学会幹事 (2018–).

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).

4th China-Japan-Korea Tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry, Organizing Committee (2019).

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).

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).

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–).

東京大学物性研究所計算物質科学研究センター運営委員会委員 (2016–).

その他

National Research Foundation of Korea 審査員 (2015–2017).

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

National Academy of Sciences in India 評価員 (2018).

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

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

計算科学研究機構人材育成タスクフォースWG 委員 (2015–).

計算基礎科学ネットワーク拠点分子科学分野委員 (2012–).

計算物質科学スパコン共用事業運営委員会委員 (2015–).

総合研究大学院大学教育研究委員会委員 (2015–).

総合研究大学院大学インターンシップ制度検討分科会委員 (2015–).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「生体分子シミュレーション入門」, 2018年12月11日–12日.

B-10) 競争的資金

二国間交流事業日印共同研究, 「水の局所構造と水素結合ダイナミクス: 過冷却水と二成分液体」, 斉藤真司 (2018年度–2019年度).

科研費若手研究(B), 「時計タンパク質における時空間階層運動の協奏が創る機能発現機構の理論的解明」, 甲田信一 (2018年度–2020年度).

科研費基盤研究(A), 「構造揺らぎ・構造変化に基づく生体分子の機能発現の理論的解明」, 斉藤真司 (2016年度–2020年度).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型)(公募研究), 「タンパク質の構造変化と化学反応が織り成す協働的な反応機構の解明」, 森 俊文 (2016年度–2017年度).

科研費若手研究(B), 「タンパク質の動的構造と機能発現ダイナミクスの分子論的解明」, 森 俊文 (2015年度–2018年度).

科研費研究活動スタート支援, 「天然変性タンパク質の動的構造と機能発現機構の分子論的解明」, 森 俊文 (2014年度).

科研費基盤研究(B), 「生体分子の構造履歴ダイナミクスと機能発現の分子機構の理論的解明」, 斉藤真司 (2013年度–2015年度).

科研費挑戦的萌芽研究, 「生体分子の構造変化に伴う状態遷移ダイナミクスの解析手法の開発とその応用」, 斉藤真司 (2011年度).

二国間交流事業日印共同研究, 「水および水溶液の構造とダイナミクス: 理論と実験」, 斉藤真司 (2010年度–2011年度).

科研費基盤研究(B),「線形・非線形分光シミュレーションによる緩和および反応ダイナミクスの解明」, 斉藤真司 (2010年度-2012年度).

科研費特定領域研究(計画研究),「空間・時間不均一ダイナミクス理論の構築」, 斉藤真司 (2006年度-2009年度).

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。揺らぎや緩和過程に関するこれらの理論研究を踏まえ、幅広い時空間スケールをもつ凝縮系の複雑な揺らぎの中から、如何に生体分子系や(過冷却)液体等における化学反応や機能・熱力学的性質が生み出されるかについて研究を進めている。今後も、分子シミュレーションや確率過程論を利用し、生体分子系における化学反応の描像の獲得、生体分子系の構造変化やイオンチャネルを例に一分子反応論の観点から凝縮系における反応の理解に向けた研究を推進する。また、生体分子の機能に関する解析として、時計タンパク質 KaiC の概日リズムの発現に関する原子・分子の微視的レベルから数理モデルを用いた巨視的レベルでの研究を継続して進める。さらに、我々が独自に開発してきた方法論により生体分子系の励起エネルギーおよびその揺らぎの解析が可能となり、FMO タンパク質における高効率な励起エネルギー移動の機構が解明されつつある。今後、この研究を完成させるとともに、より複雑な系における励起エネルギー移動への展開を図る。以上の研究に加え、水の特異的物性発現の起源やガラス転移に関する研究も進めている。最近我々が開発した量子力学に基づく比熱やエントロピーの複素感受率の理論解析手法により、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かが明らかになってきた。この研究を完成させるとともに、さらに最近我々が報告した結果の展開として、欠陥の運動の観点から、過冷却液体やアモルファスの構造変化動力学の理論的解明を進める。

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な手法開発を目指している。特に着目するのは，多重化学結合と解離，有機機能性分子，生体反応中心などの共役分子の光化学・スピン物性，金属化合物の擬縮重電子状態などに表れる「複雑な電子状態」であり，その解明は大変興味を持たれている一方で，理論的な取り扱い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安定に求めることが可能な拡張理論 XMS-CASPT2 法の実装を行い，DMRG 波動関数を参照関数とする組み合わせを実現した。この拡張理論では，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

J. WEN, T. UTO, J. CHALUPSKÝ, D. L. CASHER, G. RAABE, J. FLEISCHHAUER, T. YANAI, H. TSUJI, K. KOMATSU and J. MICHL, “Magnetic Circular Dichroism of an Unaromatic Planar [8]Annulene,” *J. Phys. Org. Chem.* **31**(8), e3854 (16 pages) (2018). DOI: 10.1002/poc.3854

R. D. REYNOLDS, T. YANAI and T. SHIOZAKI, “Large-Scale Relativistic Complete Active Space Self-Consistent Field with Robust Convergence,” *J. Chem. Phys.* **149**, 014106 (8 pages) (2018).

R. Y. SHIMIZU, T. YANAI, Y. KURASHIGE and D. YOKOGAWA, “Electronically Excited Solute Described by RISM Approach Coupled with Multireference Perturbation Theory: Vertical Excitation Energies of Bioimaging Probes,” *J. Chem. Theory Comput.* **14**, 5673–5679 (2018).

B-4) 招待講演

T. YANAI, “DMRG-Based Multistate Multireference Perturbation Theory,” ICQC 2018 Satellite Meeting “Theoretical Studies of Magnetic Systems: Methodological Developments and Applications,” Toulouse (France), June 2018.

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).

柳井 毅, 第15回日本学術振興会賞 (2018).

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。

*) 2018年4月1日名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所教授

飯 田 健 二 (助教) (2013 年 12 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：量子力学，電気化学，統計力学

A-2) 研究課題：

a) ヘテロ界面電子系で発現する光電子機能の理論

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 異種物質が接する事で構成されるヘテロ界面系は，トランジスタやダイオード等の開発に関連してこれまで広く研究が行われてきた。近年では，遷移金属ダイカルコゲナイド等の二次元層状物質を用いて光電子デバイスの開発が盛んに進められており，その機能を設計・制御するために原子レベルの知見が求められている。そこで我々は，第一原理計算プログラム SALMON を用いて，MoS₂-Graphene ヘテロ構造の光誘起電子ダイナミクスを計算した。それにより，光励起に伴い Graphene から MoS₂ へ電子が移動するという実験事実と対応する結果が得られた。そこでこの電子移動の機構を解析したところ，原子レベルの厚みを持つ界面系に特有のものであることが明らかになった。

B-1) 学術論文

M. NODA, S. A. SATO, Y. HIROKAWA, M. UEMOTO, T. TAKEUCHI, S. YAMADA, A. YAMADA, Y. SHINOHARA, M. YAMAGUCHI, K. IIDA, I. FLOSS, T. OTOBE, K.-M. LEE, K. ISHIMURA, T. BOKU, G. F. BERTSCH, K. NOBUSADA and K. YABANA, “SALMON: Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience,” *Comput. Phys. Commun.* **235**, 356–365 (2018).

K. IIDA, M. NODA and K. NOBUSADA, “Photoinduced Electron Transfer at the Interface between Heterogeneous Two-Dimensional Layered Materials,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 21651–22658 (2018).

B-4) 招待講演

K. IIDA, “Control of Photoinduced Electron Transfer in MoS₂-Graphene Heterostructure by Applied Bias Voltage,” International Workshop on Nanoscale electron-phonon interactions via energy dissipation and fluctuation, Tokyo (Japan), July 2018.

K. IIDA, “Photoinduced Electron Dynamics of Heterointerface Systems Simulated by Massively Parallel Calculations,” International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba (Japan), November 2018.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「可視プラズモニクスの新展開：第2世代材料の学理構築」, 飯田健二(研究分担者) (2018年–2021年).

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) 量子散逸系の動力学理論に基づく凝縮相分子系における動的過程の理論研究
- b) 光・量子科学技術に基づく複雑分子系の観測と制御の理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ヘリカル構造を持つ分子系はスピン状態に依存した電荷輸送を示すことが報告されており、カイラル誘起スピン選択 (CISS) 効果として注目を集めている。しかし、スピン選択性の起源および詳細なスピン輸送機構に関して理解が不十分なままである。特に、分子系に付随するどのような要素がスピン選択性に影響を与えるかを明らかにすることは、今後の分子スピントロニクス発展のために不可欠である。本研究課題では、量子コヒーレント伝導および分子性環境由来の古典ホッピング伝導の両過程の統一的取扱いを行うことで、CISS 効果の機構の理解を目的とした理論研究を推し進めている。特に実験で観測されているスピン分極の分子長及び温度依存性と整合性を持つよう理論解析を進めている。

緑色植物の光化学系 II (PSII) 反応中心は紅色細菌の反応中心と類似の色素配置を持つが、PSII 反応中心の初期電荷分離過程は比較的良好に理解されている紅色細菌のそれとは大きく異なることがこの 20 年で明らかになってきた。本研究課題では、初期電荷分離過程における色素分子の分子内振動とタンパク質環境の影響およびそれらの競合に着目し、PSII の電荷分離の様態とそれに関与する色素分子の構造の関係性について量子動力学理論と量子化学計算を組み合わせることにより解析した。重要な成果の一つとして、全ての振動モードの寄与を考慮した場合には PSII の電荷分離速度に対するエネルギーギャップ依存性や温度依存性が見られなくなることを明らかにした。これは、PSII の電荷分離過程がタンパク質環境や外界変動に対して持つ頑健性を示唆している。

- b) 天然光合成では太陽光フォトンを吸収することで種々の動的過程が引き起こされるが、光子統計など太陽光の性質は実験で用いられるレーザー光のそれとは大きく異なる。本研究課題では、太陽光を模倣する擬サーマル光源として「時間-周波数量子もつれ光子対」を用いた新規分光計測法について研究を進めている。時間-周波数量子もつれ光子対は自発的パラメトリック下方変換 (SPDC) で生成されるが、光子対の一方を観測しない場合、他方の光子状態は熱放射と類似の量子状態・光子統計を示す。現在、光合成色素タンパク質複合体が吸収する可視光の周波数領域で、SPDC による周波数量子もつれ光子対が太陽光すなわち温度 6000 K の黒体放射の性質、また、物質との相互作用をどの程度まで模倣できるのかを量子光学および量子動力学の理論に基づいて解析を進めている。

冷却原子系の分野を中心に注目を集める Floquet Engineering 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未開の物理を探索するための舞台を与える。本年度は、複数サイトから成る分子ネットワークにおける量子ダイナミクスではサイト間相互作用に伴う位相つまり Peierls 位相が重要な制御パラメータとなり得ることに着目し、Floquet Engineering を用いて Peierls 位相を制御し得ることを示した。さらに、分子ループ構造における電荷輸送を取り上げ、ループが持つべき Chiral 対称性が自発的に破られること、その帰結として外部電圧なしで流れる電流の誘起され得ることを示した。

B-1) 学術論文

Y. FUJIIHASHI, M. HIGASHI and A. ISHIZAKI, “Intramolecular Vibrations Complement the Robustness of Primary Charge Separation in a Dimer Model of the Photosystem II Reaction Center,” *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 4921–4929 (2018).

A. KATO and A. ISHIZAKI, “Non-Markovian Quantum-Classical Ratchet for Ultrafast Long-Range Electron–Hole Separation in Condensed Phases,” *Phys. Rev. Lett.* **121**, 026001 (5 pages) (2018).

N. T. PHUC and A. ISHIZAKI, “Control of Excitation Energy Transfer in Condensed Phase Molecular Systems by Floquet Engineering,” *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 1243–1248 (2018).

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI, “Photophysical quantum dynamics of light harvesting processes in photosynthetic and photovoltaic systems,” 10th Asian Photochemistry Conference, Howard Civil Service International House, Taipei (Taiwan), December 2018.

石崎章仁, 「量子散逸系として見る光合成光捕集におけるダイナミクス」, 応用物理学会量子エレクトロニクス研究会, 上智大学軽井沢セミナーハウス, 長野県北佐久郡, 2018年12月.

石崎章仁, 「HFSP2017 若手研究者グラント」, HFSP 説明会, 熊本大学, 熊本県熊本市, 2018年10月.

石崎章仁, 「Intramolecular vibrations complement robustness of the primary charge separation in Photosystem II reaction center」, 第56回日本生物物理学学会年会, 岡山大学, 岡山県岡山市, 2018年9月.

石崎章仁, 「量子散逸系としてみる光捕集系: PSII 反応中心における初期電荷分離, 有機太陽電池における電荷再結合」, 2018年光化学討論会, 関西学院大学, 兵庫県西宮市, 2018年9月.

A. ISHIZAKI, “Molecular encryption and processing of information,” 第14回日独先端科学シンポジウム, 京都ブライトンホテル, 京都府京都市, 2018年9月.

石崎章仁, 「量子散逸系としてみる光捕集系におけるエネルギー移動・電荷分離反応」, 第58回生物物理若手の会夏の学校, 岐阜県岐阜市, 2018年8月.

A. ISHIZAKI, “Effects of dephasing upon quantum dynamical phenomena in condensed phase molecular processes,” Workshop on quantum effects in biological systems, Vilnius (Lithuania), July 2018.

石崎章仁, 「量子開放系として見る光合成光捕集系: ダイナミクスと光学応答」, 量子科学技術研究開発機構高崎量子応用研究所セミナー, 高崎量子応用研究所, 茨城県那珂郡東海村, 2018年3月.

石崎章仁, 「量子開放系として見る光合成光捕集系: ダイナミクスと光学応答」, 一般社団法人レーザー学会学術講演会第38回年次大会, 京都市勧業館みやこメッセ, 京都府左京区, 2018年1月.

石崎章仁, 「量子散逸系としてみる光捕集系におけるエネルギー移動・電荷分離」, 「革新的光物質変換」第1回公開シンポジウム, 東京工業大学, 東京都目黒区, 2018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 (2017–2018).

日本化学会東海支部常任幹事 (2017–2018).

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

東京理科大学理学部第二部, 「生命を支える光—光合成の物理と化学—」, 2018 年 9 月 29 日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「理論化学(後半, 統計力学)」, 2018 年 7 月 5 日–6 日.

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, M. Johnson and A. Ishizaki (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的理論的解析」, 石崎章仁 (2006 年–2008 年).

C) 研究活動の課題と展望

生体及び有機物質系における励起子及び電荷移動などの動力学過程は、周囲の溶媒、タンパク質、分子の核運動等の影響を受けることによって多様かつ頑健な機能を生み出しており、その全容を明晰に理解することは物理学の最も魅力的な問題の一つである。このような複雑な相互作用により生ずる非自明な機能を理解するためには、各動力学過程における様々な要素の適切な理論的取り扱いが必要である。我々は、量子散逸系のダイナミクス理論を用い、または新たに発展させ、複雑な分子系における物理現象の本質的かつ簡明な理解を得ることを目指している。また同時に、最新の量子科学技術を適用することで、従来技術と比較してより詳細な分子系の情報を得ることが可能な手法の開発に向けて研究を続けている。

計算分子科学研究部門

江 原 正 博（教授）（2008 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：量子化学，理論化学，理論触媒化学，光物性科学

A-2) 研究課題：

- a) 多発色団系・集積系の励起子分解解析法の開発と応用
- b) 励起子相互作用に基づく近赤外光バイオプローブの理論解析
- c) 電子共鳴状態の理論開発と凝縮系への展開
- d) 不均一系触媒の理論解析：高効率アミド化反応の解明
- e) 多孔性結晶の空間特性を利用した光反応の変換機構の理論解明
- f) 4成分連結反応とクロスカップリング反応が競合する複雑系錯体触媒の理論解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 非対称分子系・集合系に特徴的な光学物性に円二色性（CD）や円偏光発光（CPL）がある。CD は蛋白質や生体分子等の立体構造の決定に利用され，CPL は生体プローブや次世代光学デバイスでの応用が期待される。多発色団系分子やその集積体は，高い発光量子収率を期待でき，有望な候補群である。しかし，CD や CPL の発現機構を解明することは容易ではなく，有用な解析法・設計法が期待される。本年度，励起子相互作用に基づいて CD と CPL の構造および物理的起源を分解・解析する方法を開発した。本方法は，多数の色素群から構成される分子系・集積系の CD および CPL の分割解析が可能であり，分子設計に有用な手法である。この方法を最近合成されたスルースペース共役オリゴマーに適用した。隣接する色素間の電気遷移双極子能率の相互作用が支配的であるが，電気・磁気遷移双極子能率の相互作用も無視できないことを明らかにした。さらに分子集合系の空間制御によって強い CPL を実現するための設計指針を提示した。
- b) 核酸の蛍光イメージングは，細胞の機能解析などに広く活用されている。最近，近赤外領域で発光し，細胞内の複数の RNA を同時計測可能な ECHO プローブが開発された。ECHO プローブは，励起子相互作用に起因する発光制御の原理に基づいて設計され，標的 DNA および RNA への配位により強い発光を示す。この機能は蛍光色素二量体が形成する H 会合体に起因することが示唆されたが，その機構や定量性は明確でなかった。本研究では，ECHO プローブの蛍光色素の基礎的光物性を理論計算を用いて調査した。複数の H 会合体の局所安定構造を求めて光吸収・発光を検討し，強い蛍光発光は単量体に起因し，発光の抑制が H 会合体形成に基づくという機構を明確に示した。蛍光色素間のストークスシフトは理論計算で定量的に解析することに成功し，H 会合体形成によるダビドフ分裂は若干過大評価された。
- c) 共鳴状態は準安定状態であり，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することができる。CAP 法では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エネルギーと寿命を求める。我々は，電子共鳴状態の計算法として独自の射影型 CAP/SAC-CI 法や ACCC SAC-CI 法を開発し，様々な形状の分子に適用できるボロノイ・ポテンシャルを開発した。本年度は，分子クラスターの共鳴状態における分子間相互作用の効果を検討した。とくにメタン，エタン，水分子とエチレンの共鳴状態との相互作用について詳細に検討した。ここで得られた知見に基づいて，

本理論の分子集合系や凝縮系への展開を開始した。

- d) アミド化合物は医薬品に広く利用されており、その効率的合成法の開発は極めて重要な課題である。カルボン酸やエステルとアミンからアミド縮合を行う触媒反応は、原子効率の高いアミド（環状イミド）合成法であるが、幅広い基質に対して有効かつ剛健な固体触媒は極めて少ない。最近、ニオブ表面（ Nb_2O_5 ）が本反応に高い活性を示し、反応基質について高い一般性を持つことが実験的に見出された。本研究では、カルボン酸とアミンからアミド化合物を合成する反応について、周期的 DFT 法を用いてアルミナ・チタニア・ニオブ表面における触媒活性を解析した。その結果、触媒活性は伝導バンドの d- バンド中心や基質と活性点の軌道混成と相関しており、これらの要因によって、ニオブ表面が特に触媒活性が高いことを見出した。さらにニオブ表面が水やアミンに対して強い耐性を持つことを理論的に明らかにした。
- e) これまで多孔性結晶の空間特性を用いて反応を制御した例は極めて少ない。最近、細孔表面に十種類の認識サイトを有する多孔性結晶 Metal-Macrocyclic Framework (MMF) が開発され、この MMF 中で光照射によって反応基質の [2+2] 環化付加反応は起きず、空間特異的にオレフィン移動反応が進行することが見出された。本研究では、実験計測法とともに、この選択的光反応のメカニズムを理論計算によって検討した。光照射による Pd 活性種の生成機構および反応機構・反応経路について、実験結果と Pd-MMF モデル系の理論計算に基づいて解明した。また MMF 中で反応基質が適切に Pd 活性種に配位することを QM/QM(ONIOM) 計算によって実証し、MMF の空間制御と光遮蔽効果によって [2+2] 環化付加が阻害されることを示した。
- f) 安価な炭素資源を複数連結して付加価値の高い有機分子を効率よく作る方法は、現代社会を支える技術である。ニッケルやパラジウムを触媒に用いたブタジエンの二量化反応は C8 化合物の工業的生産手法として重要であるが、これまでの触媒では導入できる官能基に制限があった。本研究では、ブタジエン二量体に様々な炭素骨格を導入する手法を開発し、その触媒作用の詳細、特に強固な炭素-フッ素結合の切断過程を理論的に解明した。本課題で研究した触媒系は目的の 4 成分連結反応とクロスカップリング型の反応が競合し、選択性が微細なエネルギーで制御される。理論計算により競合する 4 成分連結反応およびクロスカップリング反応の複雑な触媒反応のメカニズムの全容を明らかにした。特に本触媒系は、柔軟な構造を持ち、多数の局所安定構造が存在するため高度な理論解析が必要となる。反応サイクルのみならず、置換基効果や速度論に関する実験結果を極めて良く説明することに成功した。また溶媒の配位が反応障壁を安定化し、従来切断が困難と考えられてきた強固な炭素-フッ素結合切断反応の鍵となることを明確に示した。イオン同士の位置が定まらないため、モデル構築が困難であったアニオンとカチオンが協働的に作用する反応系を適切に表現する理論計算モデルを提案した。

B-1) 学術論文

H. YONEZAWA, S. TASHIRO, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA, R. SHIMADA, T. OZAWA and M. SHIONOYA, “Preferential Photoreaction in a Porous Crystal, Metal-Macrocyclic Framework (MMF): Pd^{II} -Mediated Olefin Migration over [2+2] Cycloaddition,” *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 16610–16614 (2018).

Y. MAEDA, Y. KONNO, M. YAMADA, P. ZHAO, X. ZHAO, M. EHARA and S. NAGASE, “Control of Near Infrared Photoluminescence Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes by Functionalization with Dendrons,” *Nanoscale* **20**, 23012–23017 (2018).

P. HIRUNSI, T. TOYAO, S. M. A. H. SIDDIKI, K. SHIMIZU and M. EHARA, “Origin of Nb_2O_5 Lewis Acid Catalysis for Activation of Carboxylic Acids in the Presence of Hard Base,” *ChemPhysChem* **19**, 2848–2857 (2018). (Front Cover, p. 2804, Cover Profile p. 2809)

- R. FUKUDA, S. SAKAI, N. TAKAGI, M. MATSUI, M. EHARA, S. SAKAKI, S. HOSOKAWA and T. TANAKA**, “Mechanisms of NO–CO Reaction over Highly Dispersed Cuprous Oxide on γ -Alumina Catalyst Using Metal-Support Interfacial Site in the Presence of Oxygen: Similarity to and Difference from Biological Systems,” *Catal. Sci. Technol.* **8**, 3833–3845 (2018).
- T. IWASAKI, X. MIN, A. FUKUOKA, L. ZHU, R. QIU, T. YANG, M. EHARA, A. SUDALAI and N. KAMBE**, “Ni-Catalyzed Dimerization and Hydroperfluoroarylation of 1,3-Dienes,” *J. Org. Chem.* **83**, 9267–9277 (2018). [Highlighted in *Synfacts* **14**(9), 968 (2018)]
- A. JUNKAEW, S. NAMUANGRUK, P. MAITARAD and M. EHARA**, “Silicon-Coordinated Nitrogen-Doped Graphene as a Promising Metal-Free Catalyst for N_2O Reduction by CO: A Theoretical Study,” *RSC Adv.* **8**, 22322–22330 (2018).
- S. KINOSHITA, Y. MIYAZAKI, M. SHIMADA, Y. ONITSUKA, H. KOHGUCHI, Y. INOKUCHI, N. AKAI, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA, K. YAMAZAKI, Y. HARABUCHI, S. MAEDA, T. TAKETSUGU and T. EBATA**, “Different Photoisomerization Routes Found in the Structural Isomers of Hydroxy Methylcinnamate,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 17583–17598 (2018).
- K. TAKAGI, Y. YAMADA, R. FUKUDA, M. EHARA and D. TAKEUCHI**, “ESIPT Emission Behavior of Methoxy-Substituted 2-Hydroxyphenylbenzimidazole Isomers,” *New J. Chem.* **42**, 5923–5928 (2018).
- T. SOMMERFELD, J. B. MELUGIN and M. EHARA**, “Temporary Anion States of Ethene Interacting with Single Molecules of Methane, Ethane, and Water,” *J. Phys. Chem. A* **122**, 2580–2586 (2018).
- P. ZHAO, X. ZHAO and M. EHARA**, “Theoretical Insights into Monometallofullerene Th@C₇₆: Strong Covalent Interaction between Thorium and Carbon Cage,” *Inorg. Chem.* **57**, 2961–2964 (2018).
- T. SHIRAOGAWA, M. EHARA, S. JURINOVICH, L. CUPELLINI and B. MENNUCCI**, “Frenkel-Exciton Decomposition Analysis of Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence for Multichromophoric Systems,” *J. Comput. Chem.* **39**, 931–935 (2018).
- T. IWASAKI, A. FUKUOKA, W. YOKOYAMA, X. MIN, I. HISAKI, T. YANG, M. EHARA, H. KUNIYASU and N. KAMBE**, “Nickel-Catalyzed Coupling Reaction of Alkyl Halides with Aryl Grignard Reagents in the Presence of 1,3-Butadiene: Mechanistic Studies of Four-Component Coupling and Competing Cross-Coupling Reactions,” *Chem. Sci.* **9**, 2195–2211 (2018). [Highlighted in *Synfacts* **14**(3), 303 (2018)]

B-3) 総説, 著書

江原正博, 「クラスター触媒の理論研究: 合金効果と担体効果」, 「ナノ粒子・クラスター触媒の最前線」, 触媒 (*Catalysts and Catalysis*) **60**(3), pp. 158–164 (2018).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

- M. EHARA**, “Element Strategy for Catalysts and Batteries,” SOKENDAI Asian Winter School, “Challenges for New Frontiers in Molecular Science: From Basics to Advanced Researches,” Okazaki (Japan), December 2018.
- M. EHARA**, “Theoretical Approaches to Asymmetry: Photoreaction in MMF and Spectroscopy,” The 2nd International Symposium on Coordination Asymmetry, Tokyo (Japan), November 2018.
- M. EHARA**, “Photophysical Properties of Functional Molecules Studied by Correlated Wavefunction Theory,” Japan-India Mini Workshop, Kobe (Japan), November 2018.

M. EHARA, “Theoretical Chemistry for Complex Systems: Nanocluster and Heterogeneous Catalysts,” Pre-Conference of TOCAT8 and the 5th International Symposium of Institute for Catalysis, Sapporo (Japan), August 2018.*

M. EHARA, “Theoretical Molecular Spectroscopy using SAC-CI: Collaboration with ATR-FUV Spectroscopy,” International Conference on Advanced Molecular Spectroscopy, Nishinomiya, Hyogo (Japan), July 2018.*

江原正博,「光機能分子の励起状態に関する理論的研究」, 第3回キララルミネッセンスセミナー, 北海道, 札幌, 2018年8月.

江原正博,「担持クラスター触媒の理論・計算化学」, 第56回触媒研究懇談会, 和歌山, 2018年7月.

江原正博,「複雑系の理論・計算化学: 光機能分子への応用」, 近畿大学第14回光化学セミナー, 大阪, 2018年7月.

江原正博,「金属微粒子触媒の理論化学」, 第41回グリーンセミナー, 京都, 2018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).

江原正博, 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表彰 (2018).

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) (2017–2018).

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–).

触媒学会コンピュータの利用研究会世話人会委員 (2018–).

理論化学研究会世話人会委員 (2018–).

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).

第 21 回理論化学討論会実行委員 (2018).

第 13 回分子科学討論会実行委員 (2018–2019).

Pacificchem 2020: Triangle of Heterogeneous Catalysis, Surface Science, and Theory, Corresponding Symposium Organizer (2018–2020).

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 (2016–2017).

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).

日本学術振興会外国人特別研究員(一般)書面審査員 (2017–2018).

科学技術振興機構(JST)専門評価委員 (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 “Next Generation Li and Na Rechargeable Batteries,” Guest Editor (2017–2018).

Journal of Computational Chemistry Japan, Special Issue of “Element Strategy for Catalysts and Batteries: Approach from Theoretical and Computational Chemistry,” Guest Editor (2018–2019).

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 (2012–2021).

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 (2016–2018).

量子化学ウィンタースクール世話人 (2011–2018).

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 (2015–2018).

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).

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 (2016–2018).

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 (2016–2018).

B-8) 大学での講義、客員

総合研究院大学院大学物理科学研究科,「理論化学」,2018年7月3日-6日.

大阪大学大学院工学研究科,非常勤講師,2008年-2018年,集中講義「計算機化学」,2018年4月25日-26日.

京都大学大学院工学研究科,「量子化学II」,2018年4月-7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,拠点教授,2012年9月-.

北海道大学触媒研究所,招へい教員,2018年4月-2019年3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).

科学技術振興機構先導的物質変換領域(ACT-C),「多核金属の協働作用で生み出すクラスター触媒の新反応」,江原正博(共同研究者)(2012年-2017年).

科研費特別推進研究,「d-電子複合系の理論化学：新しい高精度大規模計算法による微視的理解と予測」,江原正博(研究分担者)(2010年-2014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(AICE),「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。分子系・分子集合系の非対称性に関わる励起子相互作用や非対称因子、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。触媒・電池元素戦略プロジェクトにおいて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) 親水性／疎水性界面におけるアミロイド β フラグメントの凝集シミュレーション
- b) 親水性／疎水性界面における全長アミロイド β の β ヘアピン構造の形成過程の解明
- c) 抗原依存蛍光反応の分子動力学シミュレーション
- d) レプリカ部分置換法の開発
- e) 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) アルツハイマー病はアミロイド β ($A\beta$) ペプチドが球状に凝集してできたオリゴマーあるいは線維状に凝集してできたアミロイド線維が原因で引き起こされると言われている。 $A\beta$ ペプチドは細胞膜表面のように親水性／疎水性界面で凝集が促進される。そこで $A\beta$ ペプチドの一部である $A\beta(16-22)$ を親水性／疎水性界面で凝集させる分子動力学シミュレーションを行った。その結果、分子間 β シート構造の比較的少ないオリゴマーは界面に沿って存在するのに対し、多くの分子間 β シート構造を持つオリゴマーは界面から水中に突き出るように存在していることが分かった。これは分子間 β シート構造を多くすると親水性残基が縁を覆うためであることを解明した。この現象はアミロイド線維の形成初期過程において親水性／疎水性界面からオリゴマーが芽のように伸びてくる現象（budding）に似ており、分子間 β シート構造形成による親水性残基の配置により解釈できることを発見した。
- b) 親水性／疎水性界面に全長の $A\beta$ ペプチドを配置した分子動力学シミュレーションも行った。昨年度までに親水性／疎水性界面では $\beta 1$ 領域と $\beta 2$ 領域に相当する部分で β ヘアピン構造を形成することが多く、これが $A\beta$ の凝集を促進させていることを明らかにしてきた。今年度は引き続き解析を行い、この β ヘアピン構造が形成される過程を明らかにした。まず $\beta 1$ および $\beta 2$ 領域でヘリックス構造が形成され、これらのヘリックス構造が界面上を移動して接近した。その後 $\beta 1$ 領域のヘリックス構造が破壊され、伸長した $\beta 1$ 領域と $\beta 2$ 領域の間に β ブリッジが形成された。さらに各アミノ酸残基の界面からの距離および α ヘリックス形成率が NMR 実験の結果と一致することも見出した。
- c) N 末端領域に蛍光標識された抗体は抗原に依存した蛍光を発することが報告されている。非天然アミノ酸導入技術を用いて N 末端領域に蛍光標識アミノ酸を導入した抗体 scFv は、抗原が存在しない場合には弱い蛍光を示し、抗原が結合すると蛍光を増大させる。この現象の機構はこれまで次のように説明されていた。抗原が存在しない場合には V_H ドメインと V_L ドメインの界面で部分的に露出した Trp 残基が蛍光基に結合し消光する。一方、抗原が存在すると Trp 残基が V_H ドメインと V_L ドメインの界面に埋まり、消光が解除される。この機構を検証するためにメタダイナミクス分子動力学シミュレーションを行った。まず、抗体が存在する時だけ V_H ドメインと V_L ドメインが互いに結合することを示した。さらにこの蛍光基は Trp 残基と最も安定に結合することも明らかにした。これらのシミュレーション結果はこれまでに提案されてきた抗体依存蛍光反応の機構を支持するものであることが分かった。
- d) これまでに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開発してきた。これまでのレプリカ置換法では、パラメータの遷移確率を計算する際にレプリカ数の階乗個の置換候補を考える必要があり、使用するレプリカの数が多くなると置換のための計算コストが高くなっていた。そこでサブグループを導

入して一度に置換するレプリカの数制限することで計算コストを削減していたが、サブグループの導入はパラメータの遷移確率を低下させるなどの問題点が残っていた。そこで今年度は、隣の温度への遷移だけを許す新たなレプリカ置換法を考案し、レプリカ部分置換法と名付けた。本手法を用いることで、遷移確率を犠牲にすることなく置換の際に考えるべき候補の数を大幅に減少させることができた。また、サブグループを導入しないので多くのレプリカを含むシミュレーションの場合でも、パラメータの遷移確率の低下を招くことなく効率の良いシミュレーションを実現できた。

- e) 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、昨年度までに水分子の計算についてはハイブリッド並列化が完成していた。今年度はタンパク質など全ての原子についてもハイブリッド並列化を行い、並列化率 99.91% という非常に高い並列化計算性能を達成した。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

Y. TACHI, Y. OKAMOTO and H. OKUMURA, “Conformational Properties of an Artificial GM1 Glycan Cluster Based on a Metal-Ligand Complex,” *J. Chem. Phys.* **149**, 135101 (8 pages) (2018).

Y. MORI, H. OKUMURA T. WATANABE and T. HOHSAKA, “Antigen-Dependent Fluorescence Response of Anti-c-Myc Quenchbody Studied by Molecular Dynamics Simulations,” *Chem. Phys. Lett.* **698**, 223–226 (2018).

H. NISHIZAWA and H. OKUMURA, “Classical Molecular Dynamics Simulation to Understand Role of a Zinc Ion for Aggregation of Amyloid- β Peptides,” *J. Comput. Chem., Jpn.* **17**, 76–79 (2018).

J. LU, K. ISHIMURA and S. SAKAKI, “Theoretical Insight into Core-Shell Preference for Bimetallic Pt-M (M = Ru, Rh, Os, and Ir) Cluster and Its Electronic Structure,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 9081–9090 (2018).

S. FURUKAWA, M. FUJITA, Y. KANATOMI, M. MINOURA, M. HATANAKA, K. MOROKUMA, K. ISHIMURA and M. SAITO, “Double Aromaticity Arising from σ - and π -Rings,” *Commun. Chem.* **1**, 60 (7 pages) (2018).

M. NODA, S. A. SATO, Y. HIROKAWA, M. UEMOTO, T. TAKEUCHI, S. YAMADA, A. YAMADA, Y. SHINOHARA, M. YAMAGUCHI, K. IIDA, I. FLOSS, T. OTOBE, K.-M. LEE, K. ISHIMURA, T. BOKU, G. F. BERTSCH, K. NOBUSADA and K. YABANA, “SALMON: Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience,” *Comput. Phys. Commun.* **235**, 356–365 (2018).

B-3) 総説、著書

H. OKUMURA, M. HIGASHI, Y. YOSHIDA, H. SATO and R. AKIYAMA, “Theoretical Approaches for Dynamical Ordering of Biomolecular Systems,” *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1862**, 212–228 (2018).

B-4) 招待講演

奥村久士, 「レプリカ置換分子動力学法の開発とアミロイド β ペプチドへの応用」, 学習院大学計算機センター特別研究プロジェクト「結晶成長の数値」第13回研究会「結晶成長とモンテカルロシミュレーション」, 東京, 2018年12月.

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凝集体の構造変化」, 第1回ExCELLSシンポジウム, 愛知, 岡崎, 2018年10月.

奥村久士,「アミロイド線維を形成するタンパク質の分子動力学シミュレーション」,化学研究会セミナー,福井,2018年9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,2018年9月.

奥村久士,「生体分子動力学シミュレーションの基礎」,第58回生物物理若手の会夏の学校,岐阜,2018年8月.

奥村久士,「アミロイドペプチドの凝集の分子動力学シミュレーション」,東京大学物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会,千葉,2018年4月.

奥村久士,「アミロイド線維の生体分子動力学シミュレーション」,企業研究会第31期CAMM フォーラム本例会,東京,2018年1月.

伊藤 暁,「A β 全長の分子動力学シミュレーション」,研究会「凝集系の理論化学」,那覇,2018年3月.

伊藤 暁,「アミロイド β ペプチドの全原子分子動力学シミュレーション」,第1回松山道後・分子論セミナー,松山,2018年12月.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations of aggregates of amyloid- β peptides,” Institute of Biological Chemistry Seminar, Taipei (Taiwan), November 2018.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics study of amyloid- β aggregates,” Seminar at Department of Chemistry, Tamkang University, New Taipei City (Taiwan), November 2018.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics study of amyloid- β aggregates,” 14th Rencontres du Vietnam Computational Biophysics at the Molecular and Meso Scales, Quy Nhon (Vietnam), October 2018.

H. OKUMURA, “Simulational studies of A β amyloid fibrils by molecular dynamics method,” 22nd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Bangkok (Thailand), August 2018.

H. OKUMURA, “Aggregation and disaggregation of amyloid- β peptides studied by molecular dynamics simulations,” Frontier Bioorganization Forum 2018, Okazaki (Japan), July 2018.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations to study aggregated amyloid β peptides,” Statphys-Taiwan-2018: Workshop on Developments in Statistical, Nonlinear, and Biological Physics, Taipei (Taiwan), June 2018.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulations of A β amyloid fibrils,” 7th Japan-Czech- Slovakia Symposium on Theoretical Chemistry, Prague (Czech), May 2018.

S. G. ITOH, “Molecular dynamics simulations of a full-length amyloid- β peptide at a hydrophobic/hydrophilic interface,” The 22nd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering, Bangkok (Thailand), August 2018.

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, 2018-), オブザーバー (2014-2018).

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 (2010-2016), 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」, 2018 年 12 月 13 日.

福井大学大学院工学研究科, 「分子科学特別講義」, 2018 年 9 月 19 日-21 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).

C) 研究活動の課題と展望

- a) これまでに全長のA β ペプチドの二量体の構造をシミュレーションで解明した。今後はより大きなオリゴマーの構造を調べる。単量体状態の全長のA β を 30 本程度水溶液中に配置して分子動力学シミュレーションを行い、その凝集過程を観察する。このシミュレーションでは 500 万原子程度の巨大系の計算を行い、単量体→二量体→三量体→四量体と凝集していく過程での構造変化を調べる。特にどのアミノ酸残基が凝集に重要な役割を果たしているのか見つけ出す。
- b) 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調べる。 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NAC 領域にあることが最近特定された。この部分の凝集過程の分子動力学シミュレーションを現在行っている。これまでのところ分子間反平行 β シート構造が最も安定に存在することを明らかにした。今後より詳細な解析を行い、 α シヌクレイン NAC 領域の凝集過程のメカニズムを解明する。
- c) クマムシは乾燥状態に置かれると乾眠状態に至る。乾眠状態では呼吸をせず生命活動も行わない。しかし、水が供給されると再び活動しだす。乾眠状態でクマムシが生命活動を行っていないにもかかわらず死なない理由はsecretory abundant heat-soluble (SAHS)という特定のタンパク質が細胞を維持しているからではないかと考えられている。水のない環境下でのSAHSがなぜ細胞を維持できるのかという疑問を解決するために分子動力学シミュレーションによる理論的研究を行う。

石 田 干 城（助教）（2004 年 11 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：理論化学，計算化学

A-2) 研究課題：

- a) 溶液内化学反応およびエネルギー移動過程に関する理論的研究
- b) 分子動力学法によるイオン液体中の液体構造と動的挙動に関する理論的研究
- c) 量子化学計算と分子動力学法を用いたイオン液体による高分子セルロースの溶解・分解過程に関する理論的研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) これまで提案・改良してきた時間依存形式による溶質分子の電子状態の時間依存変化を記述する理論的方法を色素分子中の光励起による電子移動反応プロセスの研究に応用した。この研究により，励起状態での超高速電子移動反応プロセスと溶媒和過程を光励起後フェムト秒オーダーで解析することを可能にした。現在はこの方法論を光励起によって引き起こされる生体分子や遷移金属錯体内でのエネルギー移動の問題へと適用し，計算段階へと取りかかっているところである。
- b) イオン液体中の構造解析をもとにして，イオン液体の特有の挙動の一つである構造の不均一性や室温付近でのガラス性挙動に注目して研究を進めている。分子動力学法を用いて数万原子オーダーでの大きな系の長時間シミュレーションを実行した。結果からイオン液体は，陽・陰イオンの構造の違いによって各イオン種が非一様な分布をしていることが示され，このことが構造の不均一性の原因となっていることが明らかになってきた。さらに，通常液体では過冷却状態において現れる動的不均一性と類似の挙動を，室温において示すことが示された。現在，イオン液体中の構造不均一性とイオン分子の動きとの関係や，動的不均一性の分子論的起源について研究を進めている。
- c) 生体内における細胞壁の基本骨格部分である高分子セルロースを炭水化物に分解する際にイオン液体が有効であることに注目した研究を計画，実行した。まず量子化学計算による結果から，高分子セルロース間に働くセルロース間水素結合強度は水中に較べてイオン液体中では弱められる結果が得られた。このことはイオン液体中でセルロースの分解が促進されやすい原因の1つであることがわかった。また，分子動力学シミュレーションの結果より，高分子セルロース内の疎水性領域と親水性領域ではセルロース鎖間相互作用エネルギーの弱められ方に大きな違いがあって，セルロースの溶解過程に大きく影響を及ぼしていることも明らかになった。このような溶解過程にはイオン液体の陰イオンによるセルロース間水素結合の分断力と陰イオンの動きが水中と比べて大きな役割を果たしていることが示された。

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究(公募研究),「溶液内光励起反応プロセスと溶媒和ダイナミクス」, 石田干城 (2008 年–2009 年).

科研費特定領域研究(公募研究),「分子動力学法によるイオン液体の理論的研究」, 石田干城 (2008 年–2009 年).

科研費基盤研究(C),「分子内及び分子間エネルギー移動を起源とする光機能発現の理論的解明」, 石田干城 (2011 年–2013 年).

理論・計算分子科学研究部門

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

A-1) 専門領域：理論化学，計算物質科学

A-2) 研究課題：

- a) 有機分子集合体のための高精度電子状態理論の開発
- 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) 大規模分子集合体に対する高精度電子状態理論の確立を目指して，フラグメント分子軌道法と GW/Bethe-Salpeter 方程式（GW/BSE）法を組み合わせた計算手法の開発を行った。GW/BSE 法は誘電関数を第一原理的に考慮しつつ，軌道エネルギーや励起エネルギーを計算できる手法であり，比較的低計算コストで信頼性の高い結果が得られる。本研究では，FMO 法の枠組みで分子集合体の誘電関数を効率良く計算する手法を提案し，Coulomb hole plus screened exchange（COHSEX）法に基づいた FMO-COHSEX 法の開発を行った。開発した手法をペントセン薄膜へと応用して，薄膜中のペントセン分子の軌道エネルギーの解析を行った。従来の FMO 法である electrostatic embedding の枠組みでの Hartree-Fock 法や密度汎関数法では，HOMO-LUMO gap が固体中で減少する gap renormalization の効果を正しく記述できないということがわかった。一方，新しく開発した FMO-COHSEX 法では，分子環境に応じて HOMO-LUMO gap が変化する効果を正しく記述することができた。本計算手法は，不均一環境にある分子集合体の取り扱いに適しているため，有機トランジスタや有機／有機界面などの有機デバイス系の電子状態計算に有用である。
- b) 有機太陽電池系のペントセン／C₆₀ 界面の電荷移動励起状態の解析を行った。界面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。本研究では FMO 法と Quantum mechanics/molecular mechanics（QM/MM）法を組み合わせ、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。また，電子－正孔距離や励起子の非局在化の度合いなどの量を導入して励起状態のダイアグラムを解析した。低エネルギー領域の局在電荷移動状態と，高エネルギー側の電子・正孔波動関数が広がった非局在電荷移動状態が混在することがわかった。さらに，ペントセン吸収領域（1.5–2.0 eV）では，ペントセンの励起状態と電荷移動状態の混成が起き，電子波動関数がペントセン・C₆₀ 両方に広がった電荷移動状態を形成することがわかった。電子ドナー／電子アクセプター両方に広がった電子波動関数は長距離電荷移動を引き起こすことが考えられる。

B-1) 学術論文

T. FUJITA and Y. NOGUCHI, “Development of the Fragment-Based COHSEX Method for Large and Complex Molecular Systems,” *Phys. Rev. B* **98**, 205140 (10 pages) (2018).

T. FUJITA, MD. K. ALAM and T. HOSHI, “Thousand-Atom Ab Initio Calculations of Excited States at Organic/Organic Interfaces: Toward First-Principles Investigations of Charge Photogeneration,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 26443–26452 (2018).

T. FUJITA and Y. MOCHIZUKI, “Development of the Fragment Molecular Orbital Method for Calculating Nonlocal Excitations in Large Molecular Systems,” *J. Phys. Chem. A* **122**, 3886–3898 (2018).

B-4) 招待講演

T. FUJITA, “Developments and Applications of Fragment Molecular Orbital Method for Organic Optoelectronic Materials,” The 8th NTChemWorkshop, FUKURACIA Tokyo station, Tokyo (Japan), March 2018.

T. FUJITA, “Exciton Dynamics in Organic Optoelectronic Materials,” International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) 2018, Sokhalay Angkor Resort & Spa, Siem Reap (Cambodia), March 2018.

T. FUJITA, “An Ab Initio Investigation of Charge-Transfer Excited States at Pentacene/C₆₀ Interface,” 1st UJN-IMS-SKKU Symposium on Chemistry and Materials, Jinan University, Jinan (China), August 2018.

藤田貴敏,「第一原理計算による高移動度有機半導体の励起状態の解析」, 名古屋国際会議場, 名古屋(日本), 2018年9月.

C) 研究活動の課題と展望

今後はFMO-GW/BSE法の開発を進めて、有機材料系の光電子物性についての信頼性の高い計算手法の確立を目指す。現状の実装はCOHSEX近似に基づいているため、動的遮蔽の取り込みは必須である。さらに、電子励起状態を計算するためには、BSE法と組み合わせる必要がある。計算手法の開発を進めて有機光デバイス系へ応用することにより、励起状態を形成する電子・正孔波動関数の拡がり・分極エネルギー・励起子束縛エネルギー・吸収スペクトルなどに関して解析を行う。さらに、波束ダイナミクス法と組み合わせることにより、エネルギー変換過程の実時間量子ダイナミクスへと展開していく。

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) 糖鎖分解型モーター・キチナーゼの1方向性運動メカニズムの解明
- b) トランスポーター Na^+/H^+ antiporter のイオン輸送メカニズムの解明
- 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) キチナーゼは甲殻類などの外骨格の主成分であるキチン鎖を分解しながら1方向に進むリニア分子モーターである。その動作メカニズムに実験家（飯野グループ）と共同で取り組んだ。1分子実験によるステップの検出とその速度論的解析により Burnt-bridge メカニズムによって1方向性の運動が実現されていることが分かった。さらに、全原子分子動力学シミュレーションによりステップ運動に対応する原子レベルのメカニズムが分かってきた。特に、触媒サイトにあるグルタミン酸のプロトネーション状態がキチン鎖を引き込むのに重要であることが分かった。
- b) ナトリウムイオンとプロトンを経細胞の内外で交換するトランスポーター Na^+/H^+ antiporter は、細胞内のイオン濃度調節などにかかわっており、創薬ターゲットにもなっている。そのイオン輸送メカニズムに迫るために、まずイオン結合サイトの交互アクセスを可能にするタンパク質の構造変化を、低解像度電顕データを用いた構造モデリングなどにより明らかにした。さらに、内向き・外向き開状態間の構造遷移ダイナミクスを遷移パスサンプリング手法により明らかにした。その結果、疎水性ゲートの存在が明らかになり、イオンの漏れを防ぐのに役立っていることがわかった。この疎水性ゲートの残基を実験的に変異させることで、元の野生型より早くイオンを輸送する変異体が得られた。
- 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。現在、F-BAR タンパク質・生体膜系の全原子・粗視化シミュレーションを行っていて、膜上でのタンパク質の会合や膜の曲率センシングの様子が分かってきた。

B-1) 学術論文

A. NAKAMURA, K. OKAZAKI, T. FURUTA, M. SAKURAI and R. IINO, “Processive Chitinase is Brownian Monorail Operated by Fast Catalysis after Peeling Rail from Crystalline Chitin,” *Nat. Commun.* **9**, 3814 (12 pages) (2018). doi:10.1038/s41467-018-06362-3

B-4) 招待講演

K. OKAZAKI, “Simulations of functional dynamics in biomolecular machines: motor, transporter and sensor,” 理論生物物理研究会～理論生物物理のこれからを考える～, 京都大学大学院理学研究科生物物理学教室, 京都, 2018年6月.

岡崎圭一, 「生体分子マシンにおける機能ダイナミクスの解明」, 生物物理若手の会第58回夏の学校, ぎふ長良川温泉ホテルパーク, 岐阜県岐阜市, 2018年8月.

K. OKAZAKI, “Mechanism of Na^+/H^+ antiporter from transition-path simulations: Making faster transporter based on mechanism,” Workshop: Trends in Computational Molecular Biophysics, Kanazawa, November 2018.

K. OKAZAKI, “Estimating dynamic energy landscape of biomolecular motors from single-molecule trajectories: Application to a linear motor chitinase,” An Update on Molecular Motors: Open Challenges and New Perspectives, Sendai, November 2018.

K. OKAZAKI, “Transport mechanism of sodium/proton antiporter from transition-path simulations,” The 2nd workshop on Advances in Theory and Computation of Complex Systems—Biological Systems, Nanjing (China), December 2018.

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 (2016–2018).

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-8) 大学での講義, 客員

京都大学薬学研究科, 非常勤講師, 「基礎物理化学特論」, 2018年6月15日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「トランスポーターの基質輸送速度を変える変異の理論的予測」, 岡崎圭一 (2018年–2020年).

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).

C) 研究活動の課題と展望

本グループでは, 生体分子マシンの機能ダイナミクスを理論的な手法で解明して, そのデザイン原理を探索する研究を進めている。今年度は, キチナーゼの1方向性運動に関する研究が論文として出版された。他のテーマに関しても, シミュレーションを進めていて結果が得られてきている。このようなシミュレーションによるメカニズム解明と並行して, デザイン原理に関する研究も進めていて, トランスポーターにおいて野生型よりも早い変異型を得ることに成功したり, バイオセンサー開発にも取り組んでいるところである。

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) 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。
- g) ほぼ絶対零度まで冷やした極低温のルビジウム原子集団に APM を適用することによって、60 万個の粒子の量子多体問題を近似無しに1ナノ秒(10^{-9})以内でシミュレートできる世界最速の「超高速量子シミュレータ」を開発することに成功した。それぞれ異なる研究分野で発展してきた「超高速化学」と「極低温物理」の手法を融合させた世界初の試みであり、材料科学・固体物理・溶液化学など広範囲の領域に波及効果を及ぼす新しい方法論として期待されている。

B-1) 学術論文

L. CHUNMEI, J. MANZ, K. OHMORI, C. SOMMER, N. TAKEI, J. C. TREMBLAY and Y. ZHANG, “Attosecond Control of Restoration of Electronic Structure Symmetry,” *Phys. Rev. Lett.* **121**, 173201 (6 pages) (2018).

B-3) 総説, 著書

H. KATSUKI, N. TAKEI, C. SOMMER and K. OHMORI, “Ultrafast Coherent Control of Condensed Matter with Attosecond Precision,” *Acc. Chem. Res.* **51**, 1174–1184 (2018). (*Invited Paper*)

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

大森賢治, 「量子力学に残された100年の謎に迫る」, 浜松コンファレンス, 浜松(日本), 2018年11月.*

大森賢治, 「量子力学に残された100年の謎に迫る」, 大阪大学博士課程教育リーディングプログラム「インタラクティブ物質科学・カデットプログラム」第6回インタラクティブ交流会, 関西セミナーハウス, 京都(日本), 2018年8月.*

K. OHMORI, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” CQOM Colloquium, Aarhus University, Aarhus (Denmark), May 2018.

K. OHMORI, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Garching (Germany), March 2018.

K. OHMORI, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” JQI Special Seminar, Joint Quantum Institute, College Park (U.S.A.), March 2018.

大森賢治, 「原子レベルで動作する世界最速の量子シミュレーター」, 量子物理学・ナノサイエンス第216回セミナー, 東京工業大学, 東京(日本), 2018年2月.

N. TAKEI, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” The 13th Japan-US Joint Seminar on Quantum Electronics and Laser Spectroscopy, APA Hotel Kanazawa ekimae, Kanazawa (Japan), September 2018.

武井宣幸, 「強相関リユードベリ原子を用いた超高速量子シミュレーター」, 第14回エクストリームフォトニクス研究会「アト秒から秒にいたるダイナミクス研究の最前線」, 理化学研究所和光キャンパス, 和光(日本), 2018年2月.

N. TAKEI, “Ultrafast many-body electron dynamics in a strongly correlated ultracold Rydberg gas,” Conference on Laser and Synchrotron Radiation Combination Experiment (LSC) 2018, Pacifico Yokohama, Yokohama (Japan), April 2018.

S. SUGAWA, “Experimental extraction of Chern numbers from quantum-simulated monopoles,” Workshop on Recent Developments in Chiral Matter and Topology, Taipei (Taiwan), December 2018.

素川靖司, 「冷却原子を用いたトポロジカル不変量の測定」, 応用物理学会 量子エレクトロニクス研究会「量子エレクトロニクスによる未来型情報処理」, 軽井沢(日本), 2018年12月.

B-5) 特許出願

特願 2017-077478, 特開 2018-180179, 「量子シミュレータおよび量子シミュレーション方法」, 酒井寛人, 大森賢治, 安藤太郎, 武井宣幸, 豊田晴義, 大竹良幸, 兵土知子, 瀧口 優(浜松ホトニクス(株), 自然科学研究機構), 2017年.

Application number: US15/945,016, Publication number: US 2018/0292786 A1, “Quantum simulator and quantum simulation method,” H. SAKAI(Hamamatsu Photonics K.K.), K. OHMORI(NINS), T. ANDO(Hamamatsu Photonics K.K.), N. TAKEI(NINS), H. TOYODA, Y. OHTAKE, T. HYODO and Y. TAKIGUCHI(Hamamatsu Photonics K.K.), Filing date: Apr. 4, 2018, Publication date: Oct. 11, 2018.

B-6) 受賞, 表彰

大森賢治, 文部科学大臣表彰 科学技術賞 (2018).

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 (1998–2006).

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–).

2nd International Symposium on Advanced Photonics “Attosecond Science” 組織委員 (2018).

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–).

European Science Foundation (ESF), ESF College of Expert Reviewers (2018–).

学会誌編集委員

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, IOP, Editorial Board (2018–).

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.

文部科学省からの依頼で, 日米間の「量子技術分野の今後の協力」のための米国国立科学財団 (NSF) および米国エネルギー省 (DOE) との日米政府間会議 (2018 年 3 月 9 日, ワシントン DC) に出席し, 林芳正文部科学大臣と NSF の France Córdova 長官との会談 (2018 年 5 月 1 日, ワシントン DC) における量子技術分野での日米協力に関する意見交換の実現に大きく貢献した.

EU の Quantum Technology Flagship の一環として開催された European Quantum Technologies Community Meeting (2018 年 4 月 19 日, ZEISS Forum, Oberkochen, Germany) に日本の量子科学技術コミュニティの代表として招かれ, 日本・EU・米国の各代表・政府関係者とのパネルディスカッションにおいて, 量子科学技術分野における日・米・EU 間の協力について議論。

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

総合研究大学院大学物理科学研究科, 集中講義「量子動力学」, 2018 年 12 月 17 日–27 日。

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

文部科学省「光・量子飛躍フラッグシッププログラム(Q-LEAP)」量子情報処理・大規模基礎基盤研究, 「アト秒ナノメートル領域の時空間光制御に基づく冷却原子量子シミュレータの開発と量子計算への応用」, 大森賢治 (2018 年–2028 年)。

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)。

科学技術振興機構さきがけ研究(受託研究), 「極低温ドレスト原子集団の超精密制御による非可換トポロジカル量子現象の探索」, 素川靖司 (2016 年–2020 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), 「超高速量子シミュレータの開発」, 大森賢治 (2016 年–)。

(株)日立製作所, 「超高速量子シミュレータの開発」, 大森賢治 (2018 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、量子多体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～2018 年 3 月 31 日）*）

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，その場観測・オペランド観測用軟X線吸収試料セルを開発することによって，マイクロスケール及びナノスケールでの溶液，化学反応，薬剤伝達等の化学状態マッピングを可能にした。
- 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 や強化版 GSCF4 は世界の放射光施設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きた。

B-1) 学術論文

- M. NAGASAKA, H. YUZAWA, T. HORIGOME and N. KOSUGI**, “Reliable Absorbance Measurement of Liquid Samples in Soft X-Ray Absorption Spectroscopy in Transmission Mode,” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **224**, 93–99 (2018).
- M. NAGASAKA, H. YUZAWA and N. KOSUGI**, “Intermolecular Interactions of Pyridine in Liquid Phase and Aqueous Solution Studied by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Z. Phys. Chem.* **232**, 705–722 (2018).
- M. NAGASAKA, H. YUZAWA, K. MOCHIZUKI, E. RÜHL and N. KOSUGI**, “Temperature-Dependent Structural Changes in Liquid Benzene,” *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 5827–5832 (2018).
- H. YAMANE and N. KOSUGI**, “Photoelectron Angular Distribution Induced by Weak Intermolecular Interaction in Highly Ordered Aromatic Molecules,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 26472–26479 (2018).
- M.-H. LI, H.-H. YEH, Y.-H. CHIANG, U.-S. JENG, C.-J. SU, H.-W. SHIU, Y.-J. HSU, N. KOSUGI, T. OHIGASHI, Y.-A. CHEN, P.-S. SHEN, P. CHEN and T.-F. GUO**, “Highly Efficient 2D/3D Hybrid Perovskite Solar Cells via Low-Pressure Vapor-Assisted Solution Process,” *Adv. Mater.* **30**, 1801401 (13 pages) (2018).
- Y. F. WANG, Y. C. SHAO, S. H. HSIEH, Y. K. CHANG, P. H. YEH, H. C. HSUEH, J. W. CHIOU, H. T. WANG, S. C. RAY, H. M. TSAI, C. W. PAO, C. H. CHEN, H. J. LIN, J. F. LEE, C. T. WU, J. J. WU, Y. M. CHANG, K. ASOKAN, K. H. CHAE, T. OHIGASHI, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, N. KOSUGI and W. F. PONG**, “Origin of Magnetic Properties in Carbon Implanted ZnO Nanowires,” *Sci. Rep.* **8**, 7758 (13 pages) (2018).

A. KHODABANDEH, R. D. ARRUA, B. R. COAD, T. RODEMANN, T. OHIGASHI, N. KOSUGI, S. C. THICKETT and E. F. HILDER, “Morphology Control in Polymerised High Internal Phase Emulsion Templated via Macro-RAFT Agent Composition: Visualizing Surface Chemistry,” *Polym. Chem.* **9**, 213–220 (2018).

B-3) 総説, 著書

長坂将成, 小杉信博, 「軟X線吸収分光法による水溶液の局所構造解析」, *分光研究* **67(1)**, 2–12 (2018).

長坂将成, 「軟X線吸収分光法による液体と液液界面のオペランド観測」, *Mol. Sci.* **12(1)**, A0096 (12 pages) (2018).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, “Chemical Shifts and Intermolecular Interactions in Liquid X-Ray Spectroscopy,” Workshop on Theoretical X-ray Spectroscopy (CoTXS), Stockholm (Sweden), May 2018.

M. NAGASAKA, “Interactions of Organic Molecules with Water in Aqueous Solutions Studied by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” Freigeist Workshop 2018 “Carbon Nanomaterials in Aqueous Environment: From Characterization to Applications,” Berlin (Germany), February 2018.

M. NAGASAKA, “Molecular Interaction in Liquid Phase Studied by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” The 14th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (ICES-14), Shanghai (China), October 2018.

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).

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

VUV 真空紫外光物理国際会議国際諮問委員 (2004–2008).

X線物理及び内殻過程の国際会議国際諮問委員 (2006–2008).

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

ICESS 電子分光及び電子構造国際会議国際諮問会議委員 (2006–), 副議長 (2015–2018), 議長 (2018–2021).

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

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

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

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

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).

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

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 (2016–2019).

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), 国際事業委員会書面審査員 (2009–2010, 2014–2015), 国際科学研究費審査委員 (2018), 科学研究費委員会専門委員 (2007–2008, 2012, 2016, 2017, 2018), 特別研究員等審査会専門委員・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, 2014–2018).

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・オセアニア放射光フォーラム AOFSSR 国際諮問委員及びプログラム委員 (2007, 2009), 日本代表 (2018–2019).

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

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

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

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

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

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

台湾放射光科学国際諮問委員会委員 (2008–2011).

台湾国立シンクロtron放射研究センター人事委員 (2015–2016).

台湾中央研究院研究計画審査委員 (2010–2012).

フィンランドOulu 大学物理学科教授選考外部専門委員 (2010).

フランスCNRS ANR 基盤研究審査員 (2010–2012).

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

B-10) 競争的資金

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

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

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

科研費基盤研究(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),「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

リーダーの転出により, 本グループは分子科学研究所では解散したが, 本グループの予算を投入して開発してきたビームラインはUVSOR 施設が維持管理することになった。今後はUVSOR 施設主導で, 引き続き国際的な視野に立った特徴ある共同研究を国際連携しながら進めていく予定になっている。

*) 2018 年 4 月 1 日高エネルギー加速研究機構物質構造科学研究所所長

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)と成長を観察している。

B-1) 学術論文

- J.-P. YANG, M. MEISSNER, T. YAMAGUCHI, X.-Y. ZHANG, T. UEBA, L.-W. CHENG, S. IDETA, K. TANAKA, X.-H. ZENG, N. UENO and S. KERA**, “Band Dispersion and Hole Effective Mass of Methylammonium Lead Iodide Perovskite Single Crystals,” *Sol. RRL* **2**, 1800132 (6 pages) (2018).
- Y. NAKAYAMA, H. MASATAKA, N. MORIYA, M. MEISSNER, T. YAMAGUCHI, K. YOSHIDA, M. MURATA, K. MASE, T. UEBA and S. KERA**, “Anisotropic Valence Band Dispersion of Single Crystal Pentacene as Measured by Angle-Resolved Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy,” *J. Mater. Res.* **33**, 3362–3370 (2018).
- C. YOU, F. XIA, Y. ZHAO, Y. ZHANG, Y. SHENG, Y. WU, X.-C. HANG, F. CHEN, H. MA, K. SHEN, Z. SUN, T. UEBA, S. KERA, C. ZHANG, H. ZHANG, Z.-K. CHEN and W. HUANG**, “Probing Triplet Excited States and Managing Blue Light Emission of Neutral Tetradentate Platinum (II) Complexes,” *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 2285–2292 (2018).
- Y. KASHIMOTO, K. YONEZAWA, M. MEISSNER, M. GRUENEWALD, T. UEBA, S. KERA, R. FORKER, T. FRITZ and H. YOSHIDA**, “The Evolution of Intermolecular Energy Bands of Occupied and Unoccupied Molecular States in Organic Thin Films,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 12090–12097 (2018).
- C. GAUL, M. SCHWARZE, S. SCHELLHAMMER, F. BUSSOLOTTI, S. KERA, Z. BAO, G. CUNIBERTI, K. LEO and F. ORTMANN**, “Efficient Organic Semiconductor Doping: Guidance from n-Doped C₆₀,” *Nat. Mater.* **17**, 439–444 (2018).
- C. GUO, S. SARKAR, S. REFAELY-ABRAMSON, D. A. EGGER, T. BENDIKOV, K. YONEZAWA, Y. SUDA, T. YAMAGUCHI, I. PECHT, S. KERA, N. UENO, M. SHEVES, L. KRONIK and D. CAHEN**, “Electronic Structure of Dipeptides in the Gas-Phase and as an Adsorbed Monolayer,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 6860–6867 (2018).
- M. SCHWARZE, B. D. NAAB, M. L. TIETZE, R. SCHOLZ, P. PAHNER, F. BUSSOLOTTI, S. KERA, D. KASEMANN, Z. BAO and K. LEO**, “Analyzing the n-Doping Mechanism of an Air-Stable Small-Molecule Precursor,” *ACS. Appl. Mater. Interfaces* **10**, 1340–1346 (2017).

B-3) 総説、著書

- S. KERA, T. HOSOKAI and S. DUHM**, “Characteristics of Organic–Metal Interaction: A Perspective from Bonding Distance to Orbital Delocalization,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 061008 (7 pages) (2018).

B-4) 招待講演

S. KERA, “Evolution of electron localization upon assembling the molecules on the surface,” 9th Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA-IX), Schluchsee (Germany), October 2018.

S. KERA, “Charge delocalization upon molecular assembly,” 9th International Workshop on Low Energy Electron Diffraction and Related Techniques,” Remagen (Germany), October 2018.

S. KERA, “Exploring function and property of organic materials by photoelectron spectroscopy,” Recent Progress of Organic Electronics in Japan and Korea, Nagoya (Japan), September 2018.

S. KERA, “Evolution of Electron Localization upon Molecular Assembling,” International Symposium on Spectroscopy and Dynamics at Surface and Interface, Kyoto (Japan), May 2018.

C. NUMATA, K. YONEZAWA, T. UEBA, M. MEISSNER, R. SHIRAISHI, T. YAMAGUCHI, T. TAGO, Y. SUDA, H. YOSHIDA, H. YAMANE, N. KOSUGI, C. ZWICK, R. FORKER, T. FRITZ and S. KERA, “Impacts of charge relaxation on the energy-level alignment: Tin(IV)phthalocyanine dichloride monolayer on graphite,” The 9th International Conference on Technological Advances of Thin Films and Surface Coatings, Shenzhen (China), July 2018.

解良 聡, 「分子性結晶の電子状態の特徴: 局在性の変遷」, 第79回応用物理学会秋季学術講演会(シンポジウム), 名古屋, 2018年9月.

解良 聡, 「紫外光電子分光法による有機半導体の物性・機能評価」, 日本物理学会 2018年秋季年会(シンポジウム), 京田辺, 2018年9月.

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–).

SRI (International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation) シンクロトロン放射装置技術国際会議国際諮問委員 (2018).

学会の組織委員等

The 9th Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications, International Program Committee (Germany 2018).

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28, 29, 30, 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 (2014, 2015, 2016, 2017).

第75, 76, 77, 78回応用物理学会秋季学術講演会プログラム編成委員 (2014, 2015, 2016, 2017).

第61, 62, 63, 64回応用物理学会春季学術講演会プログラム編成委員 (2014, 2015, 2016, 2017).

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).

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

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

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

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

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

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

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

科研費基盤研究(A), 「分子集合体における電子局在性とその電子-フォノン相互作用の影響」, 解良 聡 (2018 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進めている。マンパワーが極端に減少し、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時間分解光電子分光システムが残された。次年度はスタッフ雇用による新体制構築が必須で、遅滞なく研究を継続する方策を練ることが必要である。一方、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、施設長として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する。UVSOR 施設は放射光を利用した分子科学研究分野で国際的な競争力があり、欧米の先端放射光施設と相補的な国際共同研究拠点として貢献している。放射光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、運動量分解光電子顕微鏡(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準備を進めている。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も不可欠である。

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

Y. TAIRA and M. KATOH, “Generation of Optical Vortices by Nonlinear Inverse Thomson Scattering at Arbitrary Angle Interactions,” *Astrophys. J.* **860**, 45 (11 pages) (2018).

S. MATSUBA, K. KAWASE, A. MIYAMOTO, S. SASAKI, M. FUJIMOTO, T. KONOMI, N. YAMAMOTO, M. HOSAKA and M. KATOH, “Generation of Vector Beam with Tandem Helical Undulators,” *Appl. Phys. Lett.* **113**, 021106 (4 pages) (2018).

H. ZEN, T. HAYAKAWA, E. SALEHI, M. FUJIMOTO, T. SHIZUMA, J. K. KOGA, T. KII, M. KATOH and H. OHGAKI, “Generation of 1-MeV Quasi-Monochromatic Gamma-Ray for Precise Measurement of Delbrück Scattering by Laser Compton Scattering,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **1067**, 092003 (5 pages) (2018).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

A. MOCHIIHASHI, J. HASEGAWA, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, M. FUJIMOTO, K. HAYASHI and M. KATOH, “Suppression of Longitudinal Coupled Bunch Instability by Harmonic Cavity in UVSOR Electron Storage Ring,” *Proc. 9th Internat. Particle Accel. Conf. (Vancouver, 2018)*, 3280–3282 (2018).

A. MOCHIIHASHI, K. YAMAMURA, M. HOSAKA, Y. TAKASHIMA, H. OHKUMA, M. FUJIMOTO and M. KATOH, “Perturbation to Stored Beam by Pulse Sextupole Magnet and Disturbance of the Sextupole Magnetic Field in Aichi Synchrotron Radiation Center,” *Proc. 9th Internat. Particle Accel. Conf. (Vancouver, 2018)*, 4232–4234 (2018).

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, 2016–2018).

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).

高エネルギー加速器研究機構加速器研究施設運営委員 (2018-).

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

名古屋大学シンクロtron光研究センター, 客員教授, 2018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, 2018年4月-.

B-10) 競争的資金

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継続している。

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。発生法の開発から, 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など, 応用技術へ重心を移す。

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合成によるベクトルビーム発生など, UVSOR の研究環境を活用して世界に先駆けた研究を継続して進める。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継続して進める。

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

松 井 文 彦（主任研究員）（2018 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：表面物性物理学，放射光科学，電子分光計測技術

A-2) 研究課題：

- a) 電子分光装置の新規開発とビームラインの高度化
- b) 光電子回折・分光に関する現象の解明と測定手法開発
- c) 表面電子物性・化学特性にかかわる新奇現象の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ① UVSOR 型 Momentum Microscope (MM) 導入計画推進を主務としている。MM を開発した Forschungszentrum Jülich (FZJ) の電子物性部門 (PGI-6) と学術協定を結び、表面電子物性の共同研究を進めている。MM は空間・波数空間・エネルギーの幅広い範囲での高分解能測定を可能にするユニークな分析器である。電子物性研究に有力な VUV/EUV 領域での高強度・可偏光などといった UVSOR の光源特性を活かした測定機能を実現する MM をデザインし、今年度は FZJ や装置メーカーと打ち合わせを重ね導入計画を開始した。②他方、設置予定の BL6U には従来型の静電半球分析器に機械式電子軌道ディフレクタを組み合わせた広角取込み角度分解光電子分光システムが立ち上げ中であつたが、着任後これを引き継ぎユーザー利用供与の開始にこぎつけた。③並行して収差補正メッシュレンズとコリメータプレートの特徴とする新規表示型分析器の開発を進めている。①は high-end 型，②は汎用型の波数分解光電子分光装置，③は光電子ホログラフィー用の角度分解光電子分光装置という位置づけである。
- b) 連続的なエネルギー可変性が放射光の最大の特徴である。BL6U は軟X線領域（45–700 eV）をカバーする直線偏光ビームラインである。① UVSOR の測定系チームとともに光学系のオゾン洗浄を行い、分子科学で重要となる C 吸収端の光を供給できるようにした。元素選択的な共鳴励起によって価電子帯の原子軌道構成を解明できる共鳴光電子分光の実験を成功させた。吸収端にてグラファイトの π バンドが選択的に励起される様子を波数空間上で可視化したが、炭素吸収端で実現が確認できたのは分子吸着系に適応範囲を拡大していく上で重要である。②光エネルギー可変性を活かし k_z 分散を測定すると例えば層状物質の原子軌道の層間の相互作用についてユニークな情報が得られる。これまでこの光電子構造因子解析の手法を開発してきたが BL6U にて MoSe_2 の原子軌道解析を進め国際会議にて成果発表することができた。
- c) 光電子回折・分光を用いて Fe 系超伝導体やグラファイト層間化合物など層状物質超伝導体の原子構造と電子状態を研究している。層状物質は容易に劈開でき、その表面の電子状態の研究が盛んであるが、劈開容易面とバルクの平均構造は全く別物であることをいくつかの系について明らかにしてきた。分子研に着任し引き続き、試料作製・物性評価グループとの共同研究を行っている。アルカリ金属ドーピング系など嫌気性の試料を取り扱い、上述のビームラインで測定できる装置を構築している。

B-1) 学術論文

D. MORI, Y. FUJITA, T. HIROSE, K. MURATA, H. TSUCHIDA and F. MATSUI, “Atomic Characterization of Nano-Facet Nitridation at SiC (1 $\bar{1}$ 00) Surface,” *Appl. Phys. Lett.* **112**, 131603 (4 pages) (2018).

D. Y. USACHOV, A. V. TARASOV, K. A. BOKAI, V. O. SHEVELEV, O. Y. VILKOV, A. E. PETUKHOV, A. G. RYBKIN, I. I. OGORODNIKOV, M. V. KUZNETSOV, M. MUNTWILER, F. MATSUI, L. V. YASHINA, C. LAUBSCHAT and D. V. VYALIKH, “Site- and Spin-Dependent Coupling at the Highly Ordered *h*-BN/Co(0001) Interface,” *Phys. Rev. B* **98**, 195438 (10 pages) (2018).

T. MATSUSHITA, T. MURO, F. MATSUI, N. HAPPO, S. HOSOKAWA, K. OHYAMA, A. SATO-TOMITA, Y. C. SASAKI and K. HAYASHI, “Principle and Reconstruction Algorithm for Atomic-Resolution Holography,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 061002 (11 pages) (2018).

H. OTA, M. SHIMOMURA and F. MATSUI, “Separation of Surface- and Bulk-Specific Ti *L*-Edge XANES Spectra of Rutile (110) Surface,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 013601 (5 pages) (2018).

F. MATSUI, T. MATSUSHITA and H. DAIMON, “Holographic Reconstruction of Photoelectron Diffraction and Its Circular Dichroism for Local Structure Probing,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 061004 (11 pages) (2018).

M. V. KUZNETSOV, I. I. OGORODNIKOV, D. Y. USACHOV, C. LAUBSCHAT, D. V. VYALIKH, F. MATSUI and L. V. YASHINA, “Photoelectron Diffraction and Holography Studies of 2D Materials and Interfaces,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 061005 (12 pages) (2018).

F. MATSUI, H. OTA, K. SUGITA, M. MUNTWILER, R. STANIA and T. GREBER, “Parallel and Antiparallel Angular Momentum Transfer of Circularly Polarized Light to Photoelectrons and Auger Electrons at the Ni L_3 Absorption Threshold,” *Phys. Rev. B* **97**, 035424 (6 pages) (2018).

F. MATSUI, H. NISHIKAWA, H. DAIMON, M. MUNTWILER, M. TAKIZAWA, H. NAMBA and T. GREBER, “The $4\pi k_z$ Periodicity in Photoemission from Graphite,” *Phys. Rev. B* **97**, 045430 (6 pages) (2018).

B-3) 総説, 著書

F. MATSUI, “Auger Electron Spectroscopy,” in *Compendium of Surface and Interface Analysis*, Springer, Chapter 7, pp. 39–44 (2018).

F. MATSUI, “Photoelectron Diffraction,” in *Compendium of Surface and Interface Analysis*, Springer, Chapter 73, pp. 445–450 (2018).

F. MATSUI, “Photoelectron Holography,” in *Compendium of Surface and Interface Analysis*, Springer, Chapter 74, pp. 451–455 (2018).

松井文彦, 「3.4 光電子回折・光電子ホログラフィー法」, 「5.2 磁性薄膜材料への応用」, 「X線光電子分光法」, 高桑雄二編, 講談社サイエンティフィク (2018).

B-4) 招待講演

松井文彦, 「光電子ホログラフィー」, 3D活性サイト科学春の学校, 奈良先端科学技術大学院大学, 生駒, 2018年6月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

表面構造に関する国際学会 ICSOS 国際アドバイザー委員 (2017–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会マイクロビームアナリシス第 141 委員会企画幹事 (2014–).

学会誌編集委員

日本表面真空学会出版委員 (2013–).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「軌道磁気量子数計測法の確立と低次元電子物性研究への応用」, 松井文彦 (2017 年–2020 年).

科研費新学術領域研究 (研究領域提案型), 「3D 活性サイト科学のプラットフォーム構築による総括と研究支援」 (代表: 大門寛), 松井文彦 (研究分担者) (2014 年–2019 年).

科研費新学術領域研究 (研究領域提案型), 「3D 活性サイト科学の海外拠点・国際ネットワーク構築」 (代表: 大門寛), 松井文彦 (研究分担者) (2015 年–2019 年).

科研費新学術領域研究 (研究領域提案型), 「顕微光電子ホログラフィーによる活性サイトの時間分解 3D 原子イメージング」 (代表: 木下豊彦), 松井文彦 (研究分担者) (2014 年–2019 年).

大 東 琢 治 (助教) (2011 年 8 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：X線光学

A-2) 研究課題：

- a) 走査型透過軟X線顕微鏡ビームラインの発展
- b) 走査型透過軟X線顕微鏡を用いた応用手法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 2017年度にビームラインで 50 eV までのX線の出力を達成したが、主に高次光の強い影響によって、リチウムそのものの吸収スペクトルを得ることができなかった。今年度、高次光の成分を突き止め、シリコンカーバイド膜を用いてフィルタリングすることにより、初となる塩化リチウムと炭酸リチウム混合物の顕微吸収スペクトルを得ることができた。
- b) STXM に Computer Tomography を用いて HeLa S3 細胞単離核の観察を行い、これを酸素 K 吸収端近傍における3次元スペクトロスコーピー法へと発展させ、細胞単離核内の吸収スペクトルの3次元分布を測定することに成功した。またゴム材料の劣化プロセスの過程を、クライオ冷却システムを用いて分析を行ってきた。

B-1) 学術論文

M.-H. LI, H.-H. YEH, Y.-H. CHIANG, U.-S. JENG, C.-J. SU, H.-W. SHIU, Y.-J. HSU, N. KOSUGI, T. OHIGASHI, Y.-A. CHEN, P.-S. SHEN, P. CHEN and T.-F. GUO, “Highly Efficient 2D/3D Hybrid Perovskite Solar Cells via Low-Pressure Vapor-Assisted Solution Process,” *Adv. Mater.* **30**, 1801401 (13 pages) (2018).

Y. F. WANG, Y. C. SHAO, S. H. HSIEH, Y. K. CHANG, P. H. YEH, H. C. HSUEH, J. W. CHIOU, H. T. WANG, S. C. RAY, H. M. TSAI, C. W. PAO, C. H. CHEN, H. J. LIN, J. F. LEE, C. T. WU, J. J. WU, Y. M. CHANG, K. ASOKAN, K. H. CHAE, T. OHIGASHI, Y. TAKAGI, T. YOKOYAMA, N. KOSUGI and W. F. PONG, “Origin of Magnetic Properties in Carbon Implanted ZnO Nanowires,” *Sci. Rep.* **8**, 7758 (13 pages) (2018).

K. SHINOHARA, T. OHIGASHI, S. TONE, M. KADO and A. ITO, “Quantitative Analysis of Mammalian Chromosome by Scanning Transmission Soft X-Ray Microscopy,” *Ultramicroscopy* **194**, 1–6 (2018).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. OHIGASHI, A. ITO, K. SHINOHARA, S. TONE, Y. INAGAKI, H. YUZAWA and N. KOSUGI, “3-Dimensional Chemical Structures of an Isolated Cell Nucleus by a Scanning Transmission X-Ray Microscope,” *Microsc. Microanal.* **24**, 400–401 (2018).

M. M. SHIROLKAR, Y. F. WANG, Y. C. SHAO, K. H. CHEN, H. T. WANG, X. S. QIU, J. S. YANG, J. J. WU, J. W. CHIOU, T. OHIGASHI, N. KOSUGI and W. F. PONG, “Probing the Electronic Structure of BiVO₄ Coated ZnO Nanodendrite Core-Shell Nanocomposite Using X-Ray Spectroscopic and Spatially Resolved Scanning Transmission X-Ray Microscopy Studies,” *Microsc. Microanal.* **24**, 468–469 (2018).

M. HUTTULA, M. PATANEN, R. PIISPANEN, T. OHIGASHI, N. KOSUGI, S. SWARAJ, R. BELKHOU, A. PRANOVICH, T. JYSKE, P. KILPELAINEN, A. KARKONEN, R. KORPINEN, T. LAAKSO, S. VALKONEN and P. SARANPAA, “STXM Chemical Mapping of Norway Spruce Knotwood Lignans,” *Microsc. Microanal.* **24**, 482–483 (2018).

B-4) 招待講演

T. OHIGASHI, “BL4U Spectromicroscopy Beamline—From Skin to Steel,” Special Seminar, Freie Universität Berlin, Berlin (Germany), June 2018.

T. OHIGASHI, “BL4U spectromicroscopy beamline and its application from skin to steel,” I4FUTURE, University of Oulu, Oulu (Finland), June 2018.

大東琢治, 「はやぶさ2が教えてくれる宇宙のふしぎ」, 第一回KITサイエンスカフェ, 神戸常磐大学子育て支援施設KIT, 兵庫県神戸市, November 2018.

大東琢治, 「UVSORにおける走査型透過X線顕微鏡の現状と将来展望」, 短期研究会「軟X線放射光科学のアップシフト」, 東京大学物性研究所, 千葉県柏市, December 2018.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

SpectroNanoscopy Workshop, Organizing Committee (2014–).

X線結像光学研究会幹事 (2015–).

第32回日本放射光学会年会シンポジウム組織委員会 (2018).

International Conference on X-ray Optics and Applications 2017 プログラム委員 (2016–2017).

第26回バイオイメーシング学会学術集会プログラム委員 (2017).

第13回X線結像光学研究会組織委員会 (2015).

第27回日本放射光学会年会シンポジウム組織委員会 (2013).

分子研研究会(学協会連携)・放射光学会第8回若手研究会「軟X線イメージングの描く未来」主催 (2015).

学会誌編集委員

Synchrotron Radiation News, Editor (2017–).

日本放射光学会誌編集委員 (2012–2014).

その他

第一回KITサイエンスカフェ講師 (2018).

B-8) 大学での講義, 客員

立命館大学 SR センター, 特別研究員, 2018 年.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C) (一般), 「走査型透過軟X線顕微鏡による超軽元素2次元化学状態分析法の開発」, 大東琢治 (2016 年–2018 年).

B-11) 産学連携

共同研究, (株)住友ゴム工業, 「走査型透過X線顕微鏡を用いたポリマー中の薬品・添加剤の分散及び化学状態解析」, 大東琢治 (2017 年–2019 年).

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) 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 相の組成・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。また BL7U において超伝導ギャップを観測することで、 C_4 相の組成においてのみ、超伝導ギャップのエネルギーに異常が観測された。具体的には Γ 点近傍のホール面を形成するバンドの一つが抑制されていること、さらに電子面を形成しているバンドに顕著な運動量空間依存性を観測した。この結果により観測されたフェルミ面間のネスティングを考慮することで、中性子散乱で観測されている異常な振る舞いを説明することができることがわかった。
- 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。2018 年度に試料直前に最終集光ミラーを配置することでビームを $400 \text{ (H)} \times 120 \text{ (V)} \mu\text{m}$ から $23 \text{ (H)} \times 40 \text{ (V)} \mu\text{m}$ に集光することに成功し、微小な試料や不均一な試料の測定が可能となった。また高効率スピン分解角度分解光電子分光測定の計画も進めている。
- 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 3.8 K、参照用金部で 3.2 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る。現在 UVSOR で最も高分解能な測定が可能である BL7U では、試料を 12 K までしか冷却することができないため、その性能を十分生かすことができていない。そこで今回 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、試料部において 4.5 K、参照用金部で 4.2 K を達成した。2018 年度初めにビームラインへ導入した。

B-1) 学術論文

S. CHO, B. S. KIM, B. KIM, W. KYUNG, J. SEO, M. PARK, J. W. JEON, K. TANAKA, J. D. DENLINGER, C. KIM, D. ODKHUU, B. H. KIM and S. R. PARK, “Electronic-Dimensionality Reduction of Bulk MoS_2 by Hydrogen Treatment,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 23007–23012 (2018).

T. NAKAMURA, Y. OHTSUBO, Y. YAMASHITA, S. IDETA, K. TANAKA, K. YAJI, A. HARASAWA, S. SHIN, F. KOMORI, R. YUKAWA, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA and S. KIMURA, “Giant Rashba Splitting of Quasi-One-Dimensional Surface States on $\text{Bi/InAs}(110)\text{--}(2 \times 1)$,” *Phys. Rev. B* **98**, 075431 (7 pages) (2018).

N. MURAI, K. SUZUKI, S. IDETA, M. NAKAJIMA, K. TANAKA, H. IKEDA and R. KAJIMOTO, “Effect of Electron Correlations on Spin Excitation Bandwidth in $\text{Ba}_{0.75}\text{K}_{0.25}\text{Fe}_2\text{As}_2$ as Seen via Time-of-Flight Inelastic Neutron Scattering,” *Phys. Rev. B* **97**, 241112(R) (6 pages) (2018).

Y. SUGIYAMA, C. BERNARD, Y. OKUYAMA, S. IDETA, K. TANAKA, T. GREBER and T. HIRAHARA, “Flattening and Manipulation of the Electronic Structure of h-BN/Rh(111) Nanomesh upon Sn Intercalation,” *Surf. Sci.* **672-673**, 33–38 (2018).

T. ITO, D. PINEK, T. FUJITA, M. NAKATAKE, S. IDETA, K. TANAKA and T. OUISSE, “Electronic Structure of Cr_2AlC as Observed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy,” *Phys. Rev. B* **96**, 195168 (9 pages) (2018).

B-4) 招待講演

K. TANAKA, “Suppression of superconducting gap on $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ ($x \sim 0.25$) observed by angle-resolved photoemission spectroscopy,” International Workshop on Recent Progress in Superconductivity, Pyeongchang (Korea), July 2018.

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。今年度は試料直前に最終集光ミラーを配置することでビームを $400 \text{ (H)} \times 120 \text{ (V)} \mu\text{m}$ から $23 \text{ (H)} \times 40 \text{ (V)} \mu\text{m}$ に集光することに成功し、微小な試料や不均一な試料の測定が可能となった。新しい高効率スピン分解測定手法の開発も進めている。

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（技術課長）（2017 年 10 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：原子分子分光，光化学反応動力学

B-1) 学術論文

SH. YAMAMOTO, T. OMI, H. AKAI, Y. KUBOTA, Y. TAKAHASHI, Y. SUZUKI, Y. HIRATA, K. YAMAMOTO, R. YUKAWA, K. HORIBA, H. YUMOTO, T. KOYAMA, H. OHASHI, S. OWADA, K. TONO, M. YABASHI, E. SHIGEMASA, S. YAMAMOTO, M. KOTSUGI, H. WADATI, H. KUMIGASHIRA, T. ARIMA, S. SHIN and I. MATSUDA, “Element Selectivity in Second-Harmonic Generation of GaFeO₃ by a Soft-X-Ray Free-Electron Laser,” *Phys. Rev. Lett.* **120**, 223902 (5 pages) (2018).

K. TAMASAKU, E. SHIGEMASA, Y. INUBUSHI, I. INOUE, T. OSAKA, T. KATAYAMA, M. YABASHI, A. KOIDE, T. YOKOYAMA and T. ISHIKAWA, “Nonlinear Spectroscopy with X-Ray Two-Photon Absorption in Metallic Copper,” *Phys. Rev. Lett.* **121**, 083901 (5 pages) (2018).

J. PALAUDOUX, T. KANEYASU, L. ANDRIC, S. CARNIATO, G. GAMBLIN, F. PENENT, Y. HIKOSAKA, E. SHIGEMASA, K. ITO, S. FRITZSCHE, R. KUKK, S. SHEINERMAN, R. F. FINK, P. LABLANQUIE and R. PÜTTNER, “Selectivity of the Br 3d⁻¹ Auger Decays in HBr,” *Phys. Rev. A* **98**, 043406 (15 pages) (2018).

B-8) 大学での講義，客員

新潟大学大学院自然環境科学科，自然環境科学集中講義「原子分子物理学Ⅱ」，2018 年 11 月 15 日–16 日，12 月 6 日–7 日。

岩 山 洋 士（助教）（2010 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：軟X線分子分光，光化学反応動力学

A-2) 研究課題：

- a) 透過型X線吸収分光法による液晶相の局所構造解析
- b) 内殻励起およびイオン化された原子・分子・クラスターの緩和ダイナミクスの研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 透過型X線吸収法を用いて液晶物質についての研究を進めている。液晶分子は分子が凝集し集団となることで複屈折などの機能を有する材料であり，分子1個の性質を調べただけではその機能・物性解明には不十分である。応用上重要な液晶分子のネマティック相は長距離秩序がないが，分子集団の配向性が揃うことで，複屈折率などの重要な機能が発現する。そのため，分子内の主要な部分がどのような配向を取りながら配列しているかなどの構造情報が重要であり，X線吸収分光法（XAS）のような局所構造解析手法が有益だと考えられる。液晶相は液体相同様に蒸気圧の観点から真空槽に導入することができず，従来計測が不可能であった。一般には蒸着による固相を液晶モデルとした研究のみである。そこで試料厚を 10 nm から数 100 nm に調整できる液体セルを用いて，in situ 液晶相での液晶分子を対象に透過型 XAS 計測を行った。実験で用いた試料は，代表的な液晶分子であり棒状形状を有する 4-Cyano-4'-pentylbiphenyl を用い，また固相・液晶相また液晶相・液体相の相転移温度がそれぞれ 22 °C，35 °C と常温付近であるため，試料温度を制御することで3つの相での XAS 測定を行った。その結果，XAS スペクトル形状は各相ではほぼ同じであったが，内殻共鳴のピークエネルギーがわずかに変化する様子が観測された。これは，固相・液晶層・液体相で局所的な構造の変化を反映していると考えられる。このように，液晶材の局所構造に依存した電子状態研究に関して透過 XAS 法が有益な手段となり得ることを示した。
- b) 内殻励起した窒素分子クラスターを用いて2つの窒素分子間の分子間クーロン緩和（ICD）過程について研究した。ICD 過程の特徴として，2価イオン化の閾値を下げる効果が挙げられる。これは，1つの分子を2価イオン化するよりも，2つの分子をそれぞれ1価イオン化したほうが分子間のクーロンエネルギーを考慮しても，エネルギーが低くなるためである。そこで，孤立窒素分子と窒素分子クラスターの2価イオン化閾値をオージェ電子・イオン同期法により計測し，窒素分子クラスターの2価イオン化閾値が孤立窒素分子に比べて低下していることを観測した。

B-4) 招待講演

H. IWAYAMA, "Interaction of rare gas clusters with intense EUV-FEL pulses," Marc Simon work shop on atomic and molecular photoionization dynamics, Tokyo (Japan), August 2018.

B-6) 受賞，表彰

岩山洋士，原子衝突若手奨励賞 (2018).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

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 (2014).

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プログラム委員 (2015).

日本物理学会領域1運営委員(原子・分子分科) (2018-).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2010–2012, 2018-).

B-10) 競争的資金

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–2014 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).

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

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) 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 BL36XU で我々が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。2018 年は，PEFC 電極の硫黄被毒の影響などについて取り組み，光電子分光法により様々な硫黄化学種の電位を計測することで，硫黄化学種が電極・電解質のいずれに存在するかを確定する新しい方法論を開発するなどの成果が上がった。
- b) 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。2018 年は，強磁性遷移金属窒化物超薄膜の構造・磁性の関する共同研究等を行った。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研究を継続的に進めている。

B-1) 学術論文

K. TAMASAKU, E. SHIGEMASA, Y. INUBUSHI, I. INOUE, T. OSAKA, T. KATAYAMA, M. YABASHI, A. KOIDE, T. YOKOYAMA and T. ISHIKAWA, “Nonlinear Spectroscopy with X-Ray Two-Photon Absorption in Metallic Copper,” *Phys. Rev. Lett.* **121**, 083901 (5 pages) (2018).

Y. WAKISAKA, D. KIDO, H. UEHARA, Q. YUAN, S. TAKAKUSAGI, Y. UEMURA, T. YOKOYAMA, T. WADA, M. UO, T. SAKATA, O. SEKIZAWA, T. URUGA, Y. IWASAWA and K. ASAKURA, “A Demonstration of Pt L₃-Edge EXAFS Free from Au L₃ Edge Using Log-Spiral Bent Crystal Laue Analyzers,” *Catalysts* **8**, 204 (6 pages) (2018).

T. YOKOYAMA, A. KOIDE and Y. UEMURA, “Local Thermal Expansions and Lattice Strains in Elinvar and Stainless Steel Alloys,” *Phys. Rev. Mater.* **2**, 023601 (7 pages) (2018).

S. YAMAMOTO, K. TAKEUCHI, Y. HAMAMOTO, R. Y. LIU, Y. SHIOZAWA, T. KOITAYA, T. SOMEYA, K. TASHIMA, H. FUKIDOME, K. MUKAI, S. YOSHIMOTO, M. SUEMITSU, Y. MORIKAWA, J. YOSHINOBU and I. MATSUDA, “Enhancement of CO₂ Adsorption on Oxygen-Functionalized Epitaxial Graphene Surface under Near-Ambient Conditions,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 19532–19538 (2018).

B-3) 総説, 著書

横山利彦,「燃料電池における反応を解明する」,「放射光利用の手引」, アグネ技術センター (2018).

横山利彦,「大気圧環境下の試料を光電子分光法で評価する」,「放射光利用の手引」, アグネ技術センター (2018).

Y. TAKAGI, T. URUGA, M. TADA, Y. IWASAWA and T. YOKOYAMA, “Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy for Functional Material Systems as Fuel Cells under Working Conditions,” *Acc. Chem. Res.* **51**, 719–727 (2018).

横山利彦,「新しい材料の探索・創成・開発～分子・物質合成プラットフォームの紹介～」,「特集にあたって(巻頭言)」, 金属 **88**, 3–4 (2018), 「放射光軟X線磁気円二色性を用いた薄膜磁性解析」, 金属 **88**, 103–111 (2018).

B-4) 招待講演

横山利彦,「X線分光の現況と展望」, 日本物理学会北陸支部セミナー, 富山, 2018年4月.

小坂谷貴典,「オペランド分光法による反応中の触媒表面の直接観測」, 第122回触媒討論会, 函館, 2018年9月.

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).

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 (1998–2018).

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, 2019).

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 (2012–2018).

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).

広島大学放射光科学研究センター運営委員 (2018–).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集幹事 (編集委員長) (2005–2006).

日本放射光学会誌編集委員 (2004–2006).

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」業務主任者 (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」業務主任者 (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」業務主任者 (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).

公益信託分子科学研究奨励森野基金推薦委員 (2018–).

B-8) 大学での講義, 客員

名古屋工業大学大学院工学研究科, 「物理工学特別講義1」, 2018年8月3日, 6日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「基礎物性科学」, 2018年11月6日, 13日, 27日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「物性科学概論」, e-learning, 2018年.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきかけ研究「革新的触媒の科学と創製」領域, 「オペランド観測に基づくメタン転換触媒および反応場の設計」, 小坂谷貴典 (2017年–2020年).

科研費若手研究(B), 「モデル合金触媒における動的表面構造変化と反応性に関する研究」, 小坂谷貴典 (2017年–2018年).

受託研究, 科学技術振興機構 ACCEL 研究「自己組織化技術に立脚した革新的分子構造解析」, 「ナノテクノロジープラットフォーム・結晶スポンジ法による分子構造解析」, 横山利彦 (2017年–2018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 (2015年–2017年), MEA 性能創出技術開発 (2018年–2019年), 横山利彦.

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).

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).

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, 高磁場極低温X線磁気円二色性(UVSOR)や紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の発明, 広域X線吸収微細構造(EXAFS)法と経路積分法によるインバー等磁性合金の熱膨張等などで成果を上げてきた。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線光電子分光の開発を行い, 昨年度は完全大気圧での光電子分光観測に世界で初めて成功した。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有効手法であることを示し, 今後もこれを中心課題に据えた研究を推進する。さらに, 2013年度からは放射光やX線自由電子レーザーを用いた(超)高速時間分解X線吸収法の開発的研究を進め, 光触媒等の電子・幾何構造の変化を追跡する研究を行ってきた。2017年11月に高木康多助教が転出, 2018年4月に上村洋平助教が転出したが, 2018年6月に小坂谷貴典助教が着任し, 雰囲気制御光電子分光等を用いた表面化学反応機構解明を目標とした研究への展開を始めた。現在新たな助教を公募中であり, 次年度以降はさらに新たな研究課題を視野に入れる計画である。

杉 本 敏 樹 (准教授) (2018 年 5 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：物理化学，機能物性化学，表面界面物性

A-2) 研究課題：

- a) 金属表面における氷薄膜のプロトン秩序
- b) 氷表面の構造緩和
- c) 水分解光触媒のキャリアダイナミクスを支配する水分子の水素結合

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 身の回りに存在する結晶氷 Ih は、水素結合ネットワーク中の水分子の配向が無秩序な常誘電状態にある。自発的対称性の破れに起因した氷の配向秩序相（強誘電氷 XI 相）は、72 K 以下の温度領域でしか存在できない ($T_c = 72$ K) と考えられてきた。そこで、ヘテロダイン検出法を組み合わせた“配向敏感かつ高感度な赤外-可視和周波発生 (SFG) 振動分光法”を用いて、異種界面の異方場を利用して氷の強誘電的な配向秩序（空間反転対称性の破れ）を創出可能か否かを検証した。超高真空中で 140 K の Pt(111) 基板にヘテロエピタキシャル成長させた氷薄膜に対して水分子の配向を調べた結果、表面直上の第一層の水分子が Pt 原子との相互作用で H を Pt（下地）に向けて配列した H-down 配向をとることが明らかになった。その上の氷薄膜中の水分子にもアイスルールの制約下で H-down 配向秩序が伝搬し、強誘電状態が氷膜全体に発現することが判明した。さらに、熱的安定性を調べたところ、この強誘電氷薄膜の T_c がバルク強誘電氷 XI の T_c よりも 2 倍以上も高いことが世界初で明らかになった。また、同位体効果を検証した結果、水素結合における核の量子効果の影響で、 H_2O 氷薄膜に比べて D_2O 氷薄膜の T_c が約 4 K 高温にシフトすることも突き止めた。「ヘテロ界面における異方的な相互作用を用いて、バルクとは異なる配向構造（誘電物性）や熱的安定性を有した極性分子薄膜を創成可能である」というアイデアは、新しい強誘電デバイス材料開発のブレイクスルーにつながるものと考えている。
- b) 偶数次の非線形分光である SFG 分光は、空間反転対称性を有する常誘電氷 Ih に対しては表面敏感な分光手法となる。そこで、氷 Ih(0001) 表面に対してヘテロダイン検出 SFG 振動分光を行ったところ、氷表面の第一層 (B1) から第二層 (B2) において、 $O_{B1}-H \cdots O_{B2}$ 水素結合の方が $O_{B1} \cdots H-O_{B2}$ 水素結合よりも平均的に数 % 距離が長いことが判明した。このように、氷 Ih という我々にもっとも身近な固体の表面において、水分子の up/down の向きが層間水素結合の強弱（動的揺らぎと平均的な構造）に本質的な影響を及ぼすことが世界初で明らかになった。
- c) 水分解光触媒は光誘起電荷による水の還元反応で水素を生成する事ができ、エネルギーや環境問題の解決に貢献する“化学技術”として期待されている。しかし、今後の高活性触媒開発のキーとなる“触媒表面における反応活性サイト”に関する分子レベルの知見は極めて限定的である。そこで、室温の水蒸気雰囲気下で光触媒表面のみを水液膜で覆い、粒子形状の異なる種々の TiO_2 ナノ粒子光触媒に対する赤外振動分光・光誘起電荷の過渡吸収測定、及び顕微過渡吸収を行った。その結果、「光触媒微粒子の凝集度が高いほど、界面が効率的な電荷捕捉サイトとなり反応活性が増大する」、「球状の粒子には、OH 伸縮振動が大きく低波数シフトした表面第一層吸着水が特異的に存在し、その吸着水による効率的な光誘起電荷捕捉効果により平坦な粒子よりも反応活性が高くなる」こと等が世界初で明らかになった。

B-1) 学術論文

N. AIGA, T. SUGIMOTO, Y. OTSUKI, K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, “Origins of Emergent High- T_c Ferroelectric Ordering in Heteroepitaxial Ice Film: Sum-Frequency Generation Spectroscopy of H₂O and D₂O Ice Films on Pt(111),” *Phys. Rev. B* **97**, 075410 (21 pages) (2018).

K. SHIRAI, G. FAZIO, T. SUGIMOTO, D. SELLI, L. FERRARO, K. WATANABE, M. HARUTA, B. OHTANI, H. KURATA, C. DI VALENTIN and Y. MATSUMOTO, “Water-Assisted Hole Trapping at Highly Curved Surface of Nano-TiO₂ Photocatalyst,” *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 1415–1422 (2018).

B-3) 総説, 著書

T. SUGIMOTO, “Sum-Frequency Generation Spectroscopy of Heteroepitaxial Ice Films: Unveiling Orientation of Water Molecules, and Structural and Physical Properties of Ice,” *J. Spectrosc. Soc. Jpn.* **67(5)**, 189–196 (2018). (in Japanese)

B-4) 招待講演

T. SUGIMOTO, “Unveiling emergent property and reaction activity of water molecules at heterointerface by infrared and sum-frequency generation spectroscopy,” 2018 Annual Meeting of Spectroscopical Society of Japan, Keio University Hiyoshi Campus, Yokohama, Kanagawa (Japan), May 2018.

T. SUGIMOTO, “Orientational ordering and charge-transfer dynamics of water molecular aggregates induced by symmetry breaking at solid surfaces,” 2018 Autumn Meeting The Physical Society of Japan, Doshisya University, Kyotanabe, Kyoto (Japan), September 2018.

T. SUGIMOTO, “Water-Assisted Hole Trapping at the Highly Curved Surface of Nano-Photocatalyst,” FHI-JST Joint Symposium, Fritz-Haber-Institute, Berlin (Germany), October 2018.

T. SUGIMOTO, “Toward understanding reactive surface species in photocatalytic water splitting,” The 2nd IMS-NANOTEC Joint Research Meeting, IMS, Okazaki (Japan), November 2018.

T. SUGIMOTO, “Effects of Interface on Orientational Ordering of Heteroepitaxially Grown Ice Film,” PacSurf2018, Waikoloa Beach Marriott Resort & Spa, Waikoloa Village, Hawaii (U.S.A.), December 2018.

B-6) 受賞, 表彰

T. SUGIMOTO, PCCP Prize 2018 (2018).

杉本敏樹, 日本化学会第 98 回春季年会優秀講演賞 (学術) (2018).

杉本敏樹, 日本分光学会奨励賞 (2018)

杉本敏樹, 分子科学研究奨励森野基金 (2018).

杉本敏樹, 第 33 回表面科学学術講演会講演奨励賞 (若手研究者部門) (2014).

杉本敏樹, 日本真空学会第 39 回熊谷記念真空科学論文賞 (2014).

杉本敏樹, 表面・界面スペクトロスコーピー 2010 学生奨励賞 (2010).

T. SUGIMOTO, IIS PhD Student Live 2010, Best Presentation Award (2010).

杉本敏樹, 第 49 回真空に関する連合講演会優秀ポスター賞 (2008).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面科学会関西支部幹事 (2013–2018).

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・学術研究所科学技術動向研究センター専門調査員 (2014–2016).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究, 「オペランド分光計測に基づくメタンの部分酸化還元光触媒反応場の創製と学理構築」, 杉本敏樹 (2016年–2019年).

科研費若手研究(A), 「光触媒／水界面における完全水分解反応の活性増大メカニズムの解明」, 杉本敏樹 (2016年–2018年).

科研費新学術領域研究(公募研究), 「星間ダスト表面におけるアモルファス氷の強誘電性と触媒機能」, 杉本敏樹 (2016年–2017年).

科研費新学術領域研究(公募研究), 「星間ダスト表面におけるアモルファス氷の強誘電性と触媒機能」, 杉本敏樹 (2014年–2015年).

科研費若手研究(B), 「構造を規定した酸化物–擬似液体水界面における光触媒メカニズムの解明」, 杉本敏樹 (2014年–2015年).

科研費研究活動スタート支援, 「水分子雰囲気下における, よく規定された酸化物表面の光触媒メカニズムの解明」, 杉本敏樹 (2012年).

C) 研究活動の課題と展望

ヘテロダイン検出法と周波発生(SFG)振動分光法や時間分解赤外吸収分光等による, 金属や酸化物表面における水分子凝集系の研究により, 「終端(表面・界面)が存在する不均一な水分子凝集系においては, たった一分子層の水分子の配向(水素の配置)が周辺の水素結合の構造や誘電物性等に大きな影響を及ぼす」ことが分かってきた。しかし, これらの知見に関して更に根源的なレベルでの疑問点「そもそも固体表面のどのようなファクターによって第一層水分子吸着系に配向秩序が創発されるのか? その際に, 全体としてH-up状態が優勢になるのかH-down状態が優勢になるのかを決める要因は何なのか?」などに関しては, 現時点ではほとんど何も分かっていない。これらの根本的なメカニズムを解明するためには, 原子レベルで構造を規定・制御した種々の固体表面上の水分子凝集系に対して系統的なSFG測定を展開していく必要がある。それと同時に, 水素感度と極微空間分解能を有する新しい非線形顕微分光法を開発し, より本質的な微視的知見に迫る高度な分光研究を展開していく必要がある。今後のこのような研究展開により, 水分子凝集系の特異的な構造や物性, 化学的機能を自在にデザイン・制御するための表面科学を開拓し, 基礎学理構築を目指す。

電子物性研究部門

中 村 敏 和（准教授）（1998 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：物性物理学，物質科学，磁気共鳴

A-2) 研究課題：

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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機導体・低次元スピン系の特異な電子状態に興味を持ち，微視的な観点からその電子状態やスピン・電荷ダイナミクスを明らかにするために磁気共鳴測定を行っている。一次元電子系の競合電子相の起源に迫るために，4 GPa に迫る系統的な超高圧力下の NMR 測定ならびにパルス ESR を行い，リエントラント反強磁性相や量子臨界点の是非，電荷秩序相と基底状態の相関について研究を行っている。この他，新規な自己ドーピング型有機導体の強磁場 ESR を用いた研究，新規な金属錯体や導電性分子物質に関する微視的研究も行っている。
- b) 分子研所有のパルスおよび高周波 ESR を用いて，高分解能 ESR・高エネルギー特性を利用した複雑なスピン構造の決定，多周波領域にわたるスピン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

T. NAKAMURA, M. ASADA, M. YOSHIDA, M. KONDO and S. MASAOKA, “Possibility of Dielectric Material: Magnetic Resonance Study of Oxo-Bridged Dinuclear Ruthenium Mixed-Valence Complex,” *ChemistrySelect* **3**, 10526–10531 (2018).
T. NAKAMURA, T. IKOMA and K. YAMADA, “Recent Developments in Electron Spin Science and Technology in Japan,” *Appl. Magn. Reson.* **49**, 755–756 (2018).
T. ENOMOTO, M. KONDO, M. ASADA, T. NAKAMURA and S. MASAOKA, “Near-IR Light-Induced Electron Transfer via Dynamic Quenching,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 11282–11287 (2018).

B-4) 招待講演

T. NAKAMURA, “Electronic Structure Investigation of Self-Doped Type Organic Conductors by High-Field ESR Spectroscopy,” The University of Queensland’s St. Lucia campus, Queensland (Australia), September 2018.

B-6) 受賞，表彰

中村敏和，日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員の表彰 (2018).
中村敏和，日本物理学会第 22 回論文賞 (2017).
中村敏和，日本学術振興会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).

杉浦晃一, 日本化学会東海支部長賞 (2010).

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 (2016–2018).

電子スピンスイエンズ学会代議員 (2018–).

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).

日本学術振興会特別研究員等審査委員会専門委員, 卓越研究員候補者選考委員会書面審査委員及び国際事業委員会書面審査委員・書面評価員 (2016–2018).

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター共同利用・共同研究運営協議会委員 (2017-).

大阪市立大学共用化事業ESR 委員会委員 (2018-).

学会誌編集委員

電子スピンサイエンス学会編集委員 (2003).

電子スピンサイエンス学会編集委員長 (2004-2005).

電子スピンサイエンス学会編集アドバイザー (2006-2013).

B-10) 競争的資金

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

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

科研費基盤研究(B),「低次元系の特異な電子相を利用したデバイス創製ならびにスピンドYNAMICS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) 有機太陽電池の開放端電圧の決定機構の解明とドーピングによる制御
- b) 有機単結晶ドーピング機構の解明とドーピング有機単結晶太陽電池の作製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) フタロシアニン (H_2Pc) / フラーレン (C_{60}) からなる 2 層型セルについて，開放端電圧 (V_{oc}) の温度依存性，光強度依存性などを評価し， $\text{C}_{60}/\text{H}_2\text{Pc}$ 界面のキャリア再結合が V_{oc} 減少の主要原因であり，直接再結合機構によって 0.55 V，トラップを介した再結合機構によって 0.32 V の開放端電圧減少を生じることを定量的に示した。 V_{oc} 増大には， $\text{C}_{60}/\text{H}_2\text{Pc}$ 界面を結晶化して浅いトラップの濃度を減少させる方法が有効と考えている。
さらに，同じ $\text{C}_{60}/\text{H}_2\text{Pc}$ セルについて，ドーピング効果を検証した。界面近傍の H_2Pc 側への n 型ドーピングによって，界面のエネルギー接続を操作し，意図的に V_{oc} 増大できることを証明した。
- b) 表面ドーピングしたルブレ単結晶において，Hall 効果測定によるキャリア濃度の温度依存性から，ドーピングキャリア生成の活性化エネルギー 5.7 meV を観測し，室温ではほぼ 100% の効率でキャリア生成できることを示した。これは，シリコン並みのドーピング効率実現の可能性を示唆している。
ドーピングしたルブレ単結晶太陽電池を試作した。p 型ドーピングしたルブレ層を通して，2 mm × 1 mm の巨視的面積の pn ホモ接合で光生成したキャリアを，ほぼ 100% の効率で収集できた。ルブレ単結晶は 2.7 μm の非常に長い励起子拡散距離を持つため，46% の効率で励起子を pn ホモ接合に収集できた。この結果は，バルクヘテロ接合の不必要な新構造有機太陽電池が実現できることを示唆している。

B-1) 学術論文

N. SHINTAKU, M. HIRAMOTO and S. IZAWA, “Effect of Trap-Assisted Recombination on Open-Circuit Voltage Loss in Phthalocyanine/Fullerene Solar Cells,” *Org. Electron.* **55**, 69–74 (2018).
N. SHINTAKU, M. HIRAMOTO and S. IZAWA, “Controlling Open-Circuit Voltage in Organic Solar Cells by Impurity Doping,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 5248–5253 (2018).
S. IZAWA, N. SHINTAKU and M. HIRAMOTO, “Effect of Band Bending and Energy Level Alignment at the Donor/Acceptor Interface on Open-Circuit Voltage in Organic Solar Cells,” *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 2914–2918 (2018).
M. HIRAMOTO, M. KIKUCHI and S. IZAWA, “Parts-per-Million-Level Doping Effects in Organic Semiconductor Films and Organic Single Crystals,” *Adv. Mater.* **30**, 1801236 (15 pages) (2018). (*Invited Progress Report*)

B-3) 総説，著書

M. HIRAMOTO, “Dawn of Organic Single Crystal Electronics—Hall Effect in Doped Organic Single Crystals,” *Eng. Technol. Open Acc.* **1**(2), 555558 (2018). published March, ETOAJ.MS.ID.555558 (Invited Mini Review)

M. HIRAMOTO and M. KIKUCHI, “Single Crystal Organic Photovoltaic Cells,” *Adv. Civil. Eng. Tech.* **1(2)**, ACET.000507 (2018). (Invited Mini Review)

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

M. HIRAMOTO, “Hall Effect in Bulk-doped Organic Single Crystals,” 24th World Nano Conference, Rome (Italy), May 2018.* (Keynote Speaker)

M. HIRAMOTO, “Hall Effect in Bulk-doped Organic Single Crystals,” Innovative Material Science & Nanotechnology Conference, Valencia (Spain), July 2018.

M. HIRAMOTO, “Hall Effect in Bulk-Doped Organic Single Crystals,” Thin Films 2018, The 9th International Conference on Technological Advances of Thin Films & Surface Coatings, Shenzhen (China), July 2018.

平本昌宏, 「量子解放電子—有機単結晶におけるキャリア生成と再結合」, 第79回応用物理学会秋季学術講演会, シンポジウム「深化する有機半導体結晶: 量子解放の分子科学に向けて」, 20a-231C-1, 名古屋国際会議場, 名古屋, 2018年9月.

伊澤誠一郎, 新宅直人, 菊地 満, 平本昌宏, 「バンド伝導材料による有機太陽電池の開放端電圧ロスの抑制」, 第79回応用物理学会秋季学術講演会, シンポジウム「深化する有機半導体結晶: 量子解放の分子科学に向けて」, 20a-231C-1, 名古屋国際会議場, 名古屋, 2018年9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).

第79回応用物理学会秋季学術講演会(名古屋国際会議場, 名古屋, 9/20)「深化する有機半導体結晶：量子解放の分子科学に向けて」シンポジウムオーガナイザー (2018).

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)

応用物理学会若手チャプター幹事 (2018年). (伊澤誠一郎)

第79回応用物理学会秋季学術講演会(名古屋国際会議場, 名古屋, 9/20)「深化する有機半導体結晶：量子解放の分子科学に向けて」シンポジウム世話人 (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 (2017.8–2018.3).

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).

Japanese Journal of Applied Physics (JJAP) 誌PVSEC27特集号 (vol. 57) ゲストエディター (2018).

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 (2009–2017).

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 (2012–2018).

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30年度), 大阪大学中之島センター, 「有機太陽電池(I)(II)」, 2018年1月16日.

B-9) 学位授与

新宅直人, 「Effects of Charge Carrier Behavior on Device Performance of Organic Solar Cells」, 2018年3月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

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).

科研費若手研究, 「超高移動度分子を用いた有機太陽電池」, 伊澤誠一郎(2018年–2021年).

マツダ財団研究助成, 「理論限界に迫る有機太陽電池の実現」, 伊澤誠一郎(2018年–2020年).

中部科学技術センター学術・みらい助成, 「有機太陽電池の理論限界効率への挑戦」, 伊澤誠一郎(2018年–2019年).

C) 研究活動の課題と展望

平本は, 研究員1名(菊地)を雇用し, 今年度, 有機単結晶太陽電池の試作に成功し, 科研費「有機単結晶エレクトロニクス」を推進している。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, 常に学生1名を指導し, 着任後2年半ですでに3報の論文が掲載され, さらに2報投稿中で, 研究室の柱になっている。なお, *Advanced Materials* のInvited Progress Reportに, 有機半導体ppmドーピングに関する総説が, 平本・菊地・伊澤の連名で掲載された。

また, 博士課程学生2名(新宅(D3)(2018.3卒), イジヒョン(D1)(2018.10入学)), 国際インターンシップ生, Chimie ParisTech大Armand Perrot(M1, 2017.4–2017.8), タイ国チュラロンコン大Sureerat Makmuang(M2, 2017.11–2018.4)が在籍した。これら2名の研究成果は, 半年の滞在であったにもかかわらず, 国際誌に1報が掲載され, 1報が投稿中である。なお, 1ヶ月間滞在したインド人学生Jaseela P.I.(B3, 2018.4)が, 総研大受験予定。学生は海外主体となり, 来年度は, 研究員を2名雇用してマンパワーを強化し, 研究室のアクティビティーをさらに向上させる。

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) ^{13}C 安定同位体全標識試料における ^{13}C 同種核相関固体 NMR の解析に基づく定量的原子間距離情報の同時取得
- c) 固体 NMR による新規含フッ素透明性樹脂の状態解析
- d) 固体 NMR による新規有機分子材料の状態解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) アミロイド β ペプチド ($\text{A}\beta$) 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，モデル膜として糖脂質 GM1 を含有した脂質二重膜存在下で形成される $\text{A}\beta$ 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。本年度は，これまで行った測定に基づく信号帰属の妥当性を検証するため，特に信号が密集して不確定性の高い部位を ^{13}C 安定同位体で部位特異的同位体標識した試料を複数調製し， ^{13}C 二次元相関 NMR 測定を行った。これにより確度の高い信号帰属を検証中である。さらに，複数の混合時間での磁気双極子相互作用に基づく ^{13}C 二次元相関 NMR スペクトルの解析に基づき，分子間相対配座の検討を行っている。
- b) 固体 NMR では，生体分子の系統的構造解析で一般的に用いられる安定同位体全標識試料のような多スピン系での磁気双極子相互作用に基づく磁化の時間発展を精密に解析するのは困難であり，溶液 NMR の NOESY のような確立された手法は存在しない。本研究は，東京農工大の朝倉哲朗教授のグループと行った共同研究である。 ^{13}C 安定同位体全標識した生体分子において，磁気双極子相互作用に基づく 2 次元同種核相関 NMR 法の一つ，dipolar assisted rotational resonance (DARR) から得られる同種核相関スペクトルに，proton driven spin diffusion (PDS) で用いられている解析手法を適用し，同時に複数の精密原子間距離情報が取得可能か否かを検討を行った。X 線結晶構造解析により，逆平行 β シート構造が報告されているトリアニンペプチドの ^{13}C 安定同位体全標識をモデル試料とした。複数の混合時間に対して測定した各スペクトルでの対角ピークで規格化した交差ピーク強度を混合時間に対してプロットし，最適曲線をフィッティングして，実験的に求めたゼロ量子曲線形状関数を考慮した場合とそうで無い場合の双方に関して原子間距離を求めた。得られた原子間距離は，ゼロ量子曲線形状関数を考慮しなくても X 線結晶解析の結果と 1–6 Å の範囲で良く一致することが判明した。本研究成果は学術論文として発表された (*J. Phys. Chem. B* **122**, 2715–2724 (2018))。
- c) 本研究は，茨城大学の福元博基准教授のグループとの共同研究であり，同グループで開発された環状フルオロアルキル骨格を有する新規含フッ素高透明性樹脂の化学組成の同定と分子構造，および状態解析を目的に固体 NMR による解析を行った。 ^{19}F 核のデカップリングをしながら ^{13}C 核を観測するには，特殊な ^1H – ^{19}F – ^{13}C 三重共鳴プローブが必要であるが，保有していないため，本測定は既設の ^1H – ^{13}C – ^{15}N 三重共鳴プローブを ^1H – ^{13}C 二重共鳴モードで， ^{19}F 核– ^{13}C 核間の強い異種核間磁気双極子相互作用により ^{13}C 核信号が広幅化するのを可能な限り抑制するため高速 MAS 条件下で行なった。同試料，およびその原料となる 3 種の試料各々に関して各種スペクトル編集測定を行い，

ほぼ全ての ^{13}C 信号の帰属を達成した。 ^{19}F 核と直接化学結合している ^{13}C 核周辺は ^1H 核が存在しないため、CPMAS による分極移動が生じにくい。さらに、プローブの仕様上 ^{19}F 核のデカップリングができないため、 ^{19}F と直接化学結合している ^{13}C 核は広幅化して信号が消失していることが判明した。これらの一連の固体 NMR の解析から、目的とした含フッ素樹脂の合成に成功していることが判明した。本研究成果は学術論文として発表された (*J. Fluorine Chem.*, in press (2018))。

- d) 現在、新規有機分子材料に関して、他大学、および企業と各 1 件の共同研究を行っている。1 件目は、新規芳香族分子材料に関する固体 NMR による精密構造、および状態解析を行っており、良好な結果が得られている。2 件目は、産学連携の有機分子材料に関する状態解析であり、現在進行中である。

B-1) 学術論文

A. NAITO, K. OKUSHITA, K. NISHIMURA, G. S. BOUTIS, A. AOKI and T. ASAKURA, “Quantitative Analysis of Solid-State Homonuclear Correlation Spectra of Antiparallel β -Sheet Alanine Tetramers,” *J. Phys. Chem. B* **122**, 2715–2724 (2018).

B-6) 受賞、表彰

西村勝之, 日本核磁気共鳴学会優秀若手ポスター賞 (2002).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本核磁気共鳴学会評議員 (2009–2010, 2013–2014).

日本核磁気共鳴学会選挙管理委員 (2005).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2004–2009).

学会の組織委員等

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

第 51 回 NMR 討論会プログラム委員 (2012).

学会誌編集委員

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

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

B-10) 競争的資金

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

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

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

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

B-11) 産学連携

共同研究, (株)日鉄ケミカル&マテリアル, 「ナノ材料の固体NMR 研究」, 西村勝之 (2018).

C) 研究活動の課題と展望

2018年度は, これまで行ってきた脂質膜上で形成されるアミロイド β ペプチドの会合中間体の構造解析完結まで後少しのところまで到達した。相当な時間を費やしたが, 極めて重要な結論が出つつあると考えている。今後は, 本研究で蓄積した解析手法を他のアミロイドの解析に適用して行きたいと考えている。また, 大学や企業の複数の研究グループと有機分子材料の固体NMRによる解析に関する共同研究を行っている。これらの共同研究も各々順調に進んでおり, 今後, 更に研究の枠を広げていきたいと考えている。本年度は主要な研究装置である 600MHz NMR 分光器の温度調節器が計画停電と共に故障し, 長期間装置が使用できない状態が続いた。同分光器は古く, サポート期間が満了している為, 一部補修部品が存在しない。今後, 故障の部位によっては修理ができない可能性がある。分光器の更新は予算的に困難と考えられ, 装置存続のために, 独自の代替モジュールの開発等の対応が必要と思われる。

小 林 玄 器 (准教授) (2018 年 4 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 AE_2LiH_3O ($AE = \text{Sr, Ba}$) を常圧下の簡便な固相反応によって合成する方法を確立した。常圧合成で得られた試料が Sr/Ba と H⁻ が欠損した組成 $AE_{2-x}LiH_{3-2x}O$ となり， AE 位置と H 位置に導入された欠損が規則配列した超格子構造をとることを結晶構造解析から明らかにした。また，Sr 系では 375 °C，Ba 系では 300 °C で欠損が不規則配列化する相転移が生じることを確認し，この相転移によって H⁻ 導電特性が大幅に向上することを見出した。
- b) K_2NiF_4 型構造の新規酸水素化物 Ba_2ScHO_3 を合成した。結晶構造解析の結果，これまで開発してきた B サイト（八面体中心）を Li⁺ が占有する物質系では，H⁻ が八面体の面内を優先的に占有するのに対し，Sc³⁺ 系では，H⁻ が八面体の頂点位置を選択的に占有することが明らかになった。この酸水素化物における H と O のアニオン配列は，ポーリング第2法則で説明することができ，O²⁻ より形式電荷の低い H⁻ は，より価数の低いカチオンの近傍を好んで占有する傾向をもつことが明らかになった。
- 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反応を検討し，窒素の水素化反応が高効率に進行することを見出した。

B-1) 学術論文

Y. IWASAKI, N. MATSUI, K. SUZUKI, Y. HINUMA, M. YONEMURA, G. KOBAYASHI, M. HIRAYAMA, I. TANAKA and R. KANNO*, “Synthesis, Crystal Structure, and Ionic Conductivity of Hydride Ion-Conducting Ln_2LiHO_3 ($Ln = \text{La, Pr, Nd}$),” *J. Mater. Chem. A* **6**, 23457–23463 (2018).

H. YAMASHITA, T. BROUX, Y. KOBAYASHI, F. TAKEIRI, H. UBUKATA, T. ZHU, M. A. HAYWARD, K. FUJII, M. YASHIMA, K. SHITARA, A. KUWABARA, T. MURAKAMI and H. KAGEYAMA*, “Chemical Pressure-Induced Anion Order-Disorder Transition in $LnHO$ Enabled by Hydride Size Flexibility,” *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 11170–11173 (2018).

F. TAKEIRI, T. YAMAMOTO, N. HAYASHI, S. HOSOKAWA, K. ARAI, J. KIKKAWA, K. IKEDA, T. HONDA, T. OTOMO, C. TASSEL, K. KIMOTO and H. KAGEYAMA*, “ $AgFeOF_2$: A Fluorine-Rich Perovskite Oxyfluoride,” *Inorg. Chem.* **57**, 6686–6691 (2018).

C. ZHONG, D. KATO, F. TAKEIRI, K. FUJII, M. YASHIMA, Y. FUJII, E. NISHIWAKI, A. KOREEDA, C. TASSEL, R. ABE and H. KAGEYAMA*, “Single Crystal Growth of Sillén–Aurivillius Perovskite Oxyhalides Bi_4NbO_8X ($X = \text{Cl, Br}$),” *Inorganics* **6**, 41 (8 pages) (2018).

R. HORIKOSHI*, F. TAKEIRI, Y. KOBAYASHI and H. KAGEYAMA, “A Gas-Reaction Apparatus Fabricated Using Readily Available Components for Demonstrating the Basic Function of Automotive Catalyst,” *Chem. Educ.* **23**, 31–34 (2018).

B-3) 総説, 著書

R. KANNO, G. KOBAYASHI, K. SUZUKI, M. HIRAYAMA, D. MORI and K. TAMURA, “Synthesis and Structures of Novel Solid-State Electrolyte,” *Nanoinformatics* pp. 279–298 (2018).

小林玄器, 「ヒドリド導電性酸水素化合物の開発」, ペトロテック (*PETROTECH*) **41(2)**, 132–137 (2018).

竹入史隆, 陰山 洋, 「複合アニオン化合物の研究の魅力」, 結晶学会誌 **60(5,6)**, 240–245 (2018).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

小林玄器, 「アニオン欠陥の無秩序化に伴う $\text{Sr}_2\text{LiH}_3\text{O}$ の H^- 超イオン導電性」, 第 28 回日本 MRS 年次大会, 北九州国際会議場, 福岡, 2018 年 12 月.

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電体の基礎とエネルギーデバイスへの応用展開」, 有機固体若手の会 2018 秋の学校, 白浜荘, 滋賀, 高島, 2018 年 11 月.

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電材料の開発と将来展望」, 第 4 回桜花城北セミナー, 大阪工業大学, 大阪, 2018 年 10 月.

G. KOBAYASHI, “High H^- Conductivity in Novel Oxyhydrides $\text{Ba}_{2-x}\text{Na}_x\text{ScH}_{1+x}\text{O}_{3-x}$,” The 8th TOYOTA RIKEN International Workshop on Organic Semiconductors, Conductors, and Electronics, Nagoya (Japan), October 2018.

小林玄器, 「層状ペロブスカイト型酸水素化合物におけるアニオン配列とヒドリドイオン導電特性」, 日本金属学会 2018 年秋季講演大会, 東北大学, 仙台, 2018 年 9 月.*

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電体の物質開発——現状と今後の展望——」, 固体化学の新しい指針を探る研究会」第 85 回定例研究会, 東京大学, 東京, 2018 年 6 月

G. KOBAYASHI, “Study on H^- Conductive Oxyhydrides,” The 1st DGIST Workshop on Energy Materials, Daegu (Korea), February 2018.

小林玄器, 「ヒドリドイオン導電体の物質設計」, 第 3 回元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>/大型研究施設連携シンポジウム, 東京大学, 東京, 2018 年 2 月.

B-6) 受賞, 表彰

小林玄器, 第 7 回石田賞 (2018).

小林玄器, 第 39 回本多記念研究奨励賞 (2018).

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).

小林玄器, 手島精一記念研究賞 (博士論文賞) (2011).

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

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

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).

第 1 回ヒドリドイオニクス研究会 (第 72 回固体イオニクス研究会) 世話人 (2018).

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」, 2018 年 12 月 8 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がけ研究「新物質科学と元素戦略」, 「ヒドリド酸化物の直接合成による新規機能性材料の探索」, 小林玄器 (2012 年–2016 年).

科研費若手研究(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, 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。また, 新たに Sc 系の酸水素化物の合成し, 構成するカチオンの組み合わせを調整することで, 酸水素化物中の H⁻ の配列を制御することに成功し, 今後の新物質開発に向けた有益な知見を得ることができた

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。

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) ヒドロゲナーゼ生成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) ヒドロゲナーゼは、多くの原核生物や一部の真核生物に含まれる金属酵素であり、水素代謝反応の中心的な役割を担っている。ヒドロゲナーゼは、その活性中心を構成する金属種の違いにより、[FeFe] 型ヒドロゲナーゼ、[NiFe] 型ヒドロゲナーゼ、[Fe] 型ヒドロゲナーゼの3種に大別される。これらのうち、[NiFe] 型ヒドロゲナーゼ中には、2分子の CN^- と1分子の CO が配位した Fe と、2つの Cys 残基が配位した Ni が、2つの Cys 残基により架橋された NiFe 二核クラスターが存在しており、この二核クラスターが [NiFe] 型ヒドロゲナーゼの活性中心として機能している。活性中心である Ni-Fe 二核金属錯体の形成を始めとし、Fe に配位した CN^- や CO の生合成にも一連のアクセサリータンパク質が関与しているが、それらの詳細な反応機構については、不明な点が多く残されている。[NiFe] 型ヒドロゲナーゼの活性中心として機能する Ni-Fe 二核金属錯体の骨格構造の一部である $\text{Fe}(\text{CO})(\text{CN})_2$ ユニットは、まず足場タンパク質（scaffold protein）として機能する HypCD 複合体中で組み立てられ、ヒドロゲナーゼの large subunit へと輸送されると推定されている。本年度の研究では、 $\text{Fe}(\text{CO})(\text{CN})_2$ ユニットの構成要素である CO の生合成に関与すると推定されるアクセサリータンパク質 HypX の結晶構造解析に成功し、得られた構造情報を基に、 CO 生合成反応の分子機構を明らかにした。HypX は、10-formyltetrahydrofolate dehydrogenase と相同性を示す N 末ドメインと、enoyl-CoA hydratase/isomerase と相同性を示す C 末ドメインから構成されていることがわかった。N 末ドメインは、リンカーで連結された2つのサブドメイン（サブドメイン A：残基 1～151、サブドメイン B：残基 182～270）から構成されていた。サブドメイン A は、6本の β ストランドと5本の α ヘリックスから構成されており、6本の β ストランドからなる mixed parallel β -sheet とそれを両側から挟む2本の α ヘリックス2組が、Rossmann fold を形成していた。19 残基からなるループで連結された N 末ドメインと C 末ドメイン間には、極性アミノ酸同士による15個の水素結合と、水分子を介した17個の水素結合が存在していた。HypX 内部には、N 末ドメインから C 末ドメインまで連続したキャビティーが存在しており、分子表面に開いた2つの開口部がキャビティーへの入口となっていた。本キャビティーの C 末ドメイン領域には、CoA 分子が結合していることがわかった。野生型 HypX の結晶をテトラヒドロ葉酸（THF）にソーキングすることにより、N 末ドメイン中のキャビティーに THF が結合した THF-CoA 結合型 HypX を調製し、その結晶構造の決定にも成功した。HypX の N 末ドメインの構造は、 N^{10} -formyl-THF を基質とするホルミル基転移酵素と高い構造相同性を示すことから、HypX による CO 生成反応においても N^{10} -formyl-THF が基質となっているものと考えられる。HypX とホルミル基転移酵素との構造比較の結果、 N^{10} -formyl-THF を基質とする HypX の酵素反応においては、His74, Asp80, Asp109 の3残基が触媒残基として機能していると考えられる。HypX 変異体の構造解析、および MD シミュレーションの結果、HypX 中に結合している CoA は、二つの異なるコンフォーメーション

ション (open 型および closed 型) を取り得ることがわかった。HypX による CO 生成反応では, まず open 型コンフォメーションをとった CoA と N 末ドメインに結合した N¹⁰-formyl-THF との間でホルミル基転位反応が進行する。その結果生成した formyl-CoA が open 型から closed 型へとコンフォメーション変化し, C 末ドメイン中で CO 生成反応が進行するものと考えられる。

B-1) 学術論文

A. PAVLOU, H. YOSHIMURA, S. AONO and E. PINAKOULAKI, “Protein Dynamics of the Sensor Protein HemAT as Probed by Time-Resolved Step-Scan FTIR Spectroscopy,” *Biophys. J.* **114**, 584–591 (2018).

B-3) 総説, 著書

青野重利, 「遷移金属含有型ガス分子センサータンパク質によるシグナルセンシング」, *生化学* **90**, 290–296 (2018).

S. AONO, “Overview of Gas-sensing Systems,” in *Gas Sensing in Cells*, S. Aono, Ed., RSC Publishing; Cambridge, Chapter 1, pp. 1–14 (2018).

S. AONO, “Haem-Based Sensors of Carbon Monoxide,” in *Gas Sensing in Cells*, S. Aono, Ed., RSC Publishing; Cambridge, Chapter 4, pp. 84–135 (2018).

B-4) 招待講演

S. AONO, “Structural Basis for Transcriptional Regulation of Heme Homeostasis in *Lactococcus lactis*,” 2018 Korea-Taiwan-Japan Bioinorganic Chemistry Symposium, Daejeon (Korea), May 2018.

S. AONO, “Structural analyses of the heme uptake machinery in *Corynebacterium glutamicum*,” 10th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-10), Munich (Germany), July 2018.

S. AONO, “Structure and function of transcriptional regulator adopting heme as a signaling molecule,” 9th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference (AsBIC-9), Singapore, December 2018.

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 (2010–2018).

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与するセンサータンパク質の構造と機能」, 青野重利 (2011年–2013年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「生物の環境センシング機能を基盤とした高感度な環境汚染物質検出システムの構築」, 青野重利 (2013年–2014年).

科研費若手研究(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、様々な外部環境変化にさらされながら生育するため、外部環境変化に応答して細胞内の恒常性を維持する精緻なシステムを有している。このような外部環境変化に応答した恒常性維持システムには、外部環境の変化を感知するためのセンサータンパク質が必要不可欠である。我々の研究グループでは、遷移金属が関与するセンサータンパク質の構造機能相関解明、および遷移金属の細胞内恒常性維持機構の解明を目指して研究を進めている。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、これらの研究を進めて行きたいと考えている。

加 藤 晃 一（教授）（2008 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：構造生物学，タンパク質科学，糖鎖生物学，NMR 分光学

A-2) 研究課題：

- a) NMR 分光法をはじめとする物理化学的手法による複合糖質およびタンパク質の構造・ダイナミクス・相互作用の解析
- b) 統合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) 抗体は免疫システムにおける主要な糖タンパク質で，バイオ医薬品の中核を占めている。代表的な抗体である免疫グロブリン G (IgG) の機能は，Fab 領域における抗原認識と Fc 領域を介して行われる様々なエフェクター分子との相互作用がカップルして発揮される。したがって，IgG の動的立体構造ダイナミクスおよび各種エフェクター分子との相互作用様式を解明することは，抗体の機能を理解する上で重要な課題である。我々は，ナチュラルキラー細胞に発現する Fcγ 受容体 (FcγR) に結合することで発揮される IgG の機能に着目した研究を行っている。これまで，X 線結晶構造解析，中性子小角散乱解析，およびレプリカ交換分子動力学計算解析を行い，IgG の Fc 領域と FcγR との相互作用様式を明らかにしてきた。2018 年度は，安定同位体標識 NMR 法を用いて抗体と FcγR との相互作用解析に取り組んだ。はじめに，IgG の Fc 領域ならびに細胞外領域のみからなる可溶型 FcγRIIIb 受容体 (sFcγRIIIb) の NMR スペクトルの完全帰属を達成した。さらに，部分的に重水素標識を施したアミノ酸を用いて調製した IgG 糖タンパク質のメチル TROSY 計測を実施した。その結果，緩和によるピーク強度減弱を大幅に軽減することができ，通常の NMR 計測では観測困難な分子量 150 kDa という巨大な IgG 全長のロイシン残基のメチル基に由来するシグナルを全て観測することに成功した。これらの計測基盤を駆使することにより，血清中という混み合った不均一環境に置かれた IgG の動的高次構造と相互作用の観測を行った。血清存在下では IgG 由来の多くのシグナルが減弱を示し，特に Fab 領域由来のシグナルにおいてこの傾向は顕著であった。このことは，IgG が血清中の成分と何らかの相互作用をしていることを意味する。より詳細な検討を行ったところ，IgG は血清中のポリクローナル IgG の Fab 領域と相互作用していることが明らかとなった。このことは，特定の抗原によって感作されていない血液環境においても，そこに内在するポリクローナル IgG が外来 IgG の主に Fab 領域を異物として認識し得ることを示唆している。一方，質量分析法を用いて血清から得られた sFcγRIIIb の部位特異的な N 型糖鎖の糖鎖プロファイリングを実施し，Fc との相互作用に関わる Asn162 における N 型糖鎖は専ら複合型糖鎖であることを明らかとした。本研究で開発した計測手法は，バイオ医薬品の評価や血中環境での分子認識メカニズムの解明など様々な応用展開が期待される。
- b) 真核生物ではプロテアソームの構造形成に集合シャペロンの介助を必要とする。一方，古細菌のプロテアソームは集合シャペロンの介助なしに自律的に形成される。それにもかかわらず，古細菌には PbaA，PbaB とよばれる 2 種類の集合シャペロンのホモログが存在しており，これらのタンパク質はいずれも C 末端部位にプロテアソームと結合するモチーフを有している。PbaB はホモ 4 量体を形成してプロテアソームを活性化する機能を持つことが先行研究で示されたが，ホモ 5 量体を形成する PbaA はプロテアソームに対する結合能を持たず，その構造機能は不明であった。我々は様々な計測手法を駆使して PbaA の構造特性をキャラクタライズした。X 線結晶構造解析により，PbaA は C 末端ヘリックスが 5 量体のコア部分の疎水性表面を覆うように折りたたまれた閉構造と，それらがコアから突き出した開構造の 2 通りの構造をとることが見出されたが，溶液散乱と原子間力顕微鏡 (AFM) 観測により，溶液中では

PbaA は主に閉構造を形成していることが示された。これにより PbaA がプロテアソームに結合能を示さない理由が明らかとなった。そこで、C 末端の開構造がプロテアソーム活性化に関わるのではないかとこの着想を得て、構造情報に基づいた分子の設計・改変を通じて、PbaA にプロテアソーム結合能を賦与することを試みた。その結果、PbaA の C 末端の変性領域を PbaB の対応する部分と入れかえることにより作製したキメラタンパク質では開構造の割合が増大しており、プロテアソームに対する結合能を獲得していることが、溶液散乱と高速 AFM 観測により明らかとなった。また実際に、生化学実験により、作出したキメラタンパク質がプロテアソーム活性化能を有していることを示した。さらに、そのような開構造の誘起には、disordered 領域に導入した2つのグルタミン酸残基の静電反発が重要であることが示された。以上のように、ホモ5量体タンパク質 PbaA の立体構造情報に基づき、C 末端領域のコンフォメーションを制御することによりプロテアソーム活性化能を賦与することに成功した。

B-1) 学術論文

H. YAGI, G. YAN, T. SUZUKI, S. TSUGE, T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Lewis X-Carrying Neoglycolipids Evoke Selective Apoptosis in Neural Stem Cells,” *Neurochem. Res.* **43**, 212–218 (2018).

M. YAGI-UTSUMI, A. SIKDAR, T. KOZAI, R. INOUE, M. SUGIYAMA, T. UCHIHASHI, H. YAGI, T. SATOH and K. KATO, “Conversion of Functionally Undefined Homopentameric Protein PbaA into a Proteasome Activator by Mutational Modification of Its C-Terminal Segment Conformation,” *Protein Eng., Des. Sel.* **31**, 29–36 (2018).

J. KICUNTOD, K. SANGPHEAK, M. MUELLER, P. WOLSCHANN, H. VIERNSTEIN, S. YANAKA, K. KATO, W. CHAVASIRI, P. PONGSAWASDI, N. KUNGWAN and T. RUNGROTMONGKOL, “Theoretical and Experimental Studies on Inclusion Complexes of Pinostrobin and β -Cyclodextrins,” *Sci. Pharm.* **86**, 5 (15 pages) (2018).

H. YAGI, D. TAKAKURA, L. T. ROUMENINA, W. H. FRIDMAN, C. SAUTÈS-FRIDMAN, N. KAWASAKI and K. KATO, “Site-Specific *N*-Glycosylation Analysis of Soluble Fc γ Receptor IIIb in Human Serum,” *Sci. Rep.* **8**, 2719 (7 pages) (2018).

K. KATO, T. FURUHASHI, K. KATO, A. ODA and E. KURIMOTO, “The Assembly Mechanism of Coiled-Coil Domains of the Yeast Cargo Receptors Emp46p/47p and the Mutational Alteration of pH-Dependency of Complex Formation,” *J. Biochem.* **163**, 441–446 (2018).

R. YOGO, S. YANAKA and K. KATO, “Backbone ^1H , ^{13}C , and ^{15}N Assignments of the Extracellular Region of Human Fc γ Receptor IIIb,” *Biomol. NMR Assignments* **12**, 201–204 (2018).

K. MUKAIGASA, T. TSUJITA, V. T. NGUYEN, L. LI, H. YAGI, Y. FUSE, Y. NAKAJIMA-TAKAGI, K. KATO, M. YAMAMOTO and M. KOBAYASHI, “Nrf2 Activation Attenuates Genetic Endoplasmic Reticulum Stress Induced by a Mutation in the Phosphomannomutase 2 Gene in Zebrafish,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **115**, 2758–2763 (2018).

N. SRIWILAIJAROEN, S. NAKAKITA, S. KONDO, H. YAGI, K. KATO, T. MURATA, H. HIRAMATSU, T. KAWAHARA, Y. WATANABE, Y. KANAI, T. ONO, J. HIRABAYASHI, K. MATSUMOTO and Y. SUZUKI, “*N*-Glycan Structures of Human Alveoli Provide Insight into Influenza A Virus Infection and Pathogenesis,” *FEBS J.* **285**, 1611–1634 (2018).

S. YANAKA, H. YAGI, R. YOGO, M. YAGI-UTSUMI and K. KATO, “Stable Isotope Labeling Approaches for NMR Characterization of Glycoproteins Using Eukaryotic Expression Systems,” *J. Biomol. NMR* **71**, 193–202 (2018).

K. MORITA, Y. Y. YAMAMOTO, A. HORI, T. OBATA, Y. UNO, K. SHINOHARA, K. NOGUCHI, K. NOI, T. OGURA, K. ISHII, K. KATO, M. KIKUMOTO, R. ARRANZ, J. M. VALPUESTA and M. YOHDA, “Expression, Functional Characterization, and Preliminary Crystallization of the Cochaperone Prefoldin from the Thermophilic Fungus *Chaetomium thermophilum*,” *Int. J. Mol. Sci.* **19**, 2452 (13 pages) (2018).

Y. HISAMATSU, N. UMEZAWA, H. YAGI, K. KATO and T. HIGUCHI, “Design and Synthesis of a 4-Aminoquinoline-Based Molecular Tweezer that Recognizes Protoporphyrin IX and Iron(III) Protoporphyrin IX and Its Application as a Supramolecular Photosensitizer,” *Chem. Sci.* **9**, 7455–7467 (2018).

Y. SAKATA, K. YABUNAKA, Y. KOBAYASHI, H. OMIYA, N. UMEZAWA, H.-S. KIM, Y. WATAYA, Y. TOMITA, Y. HISAMATSU, N. KATO, H. YAGI, T. SATOH, K. KATO, H. ISHIKAWA and T. HIGUCHI, “Potent Antimalarial Activity of Two Arenes Linked with Triamine, Designed to Have Multiple Interactions with Heme,” *ACS Med. Chem. Lett.* **9**, 980–985 (2018).

B-3) 総説, 著書

T. IKEYA, D. BAN, D. LEE, Y. ITO, K. KATO and C. GRIESINGER, “Solution NMR Views of Dynamical Ordering of Biomacromolecules,” *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1862**, 287–306 (2018).

K. MATSUZAKI, K. KATO and K. YANAGISAWA, “Ganglioside-Mediated Assembly of Amyloid β -Protein: Roles in Alzheimer’s Disease,” *Prog. Mol. Biol. Transl. Sci.* **156**, 413–434 (2018).

K. KATO, S. YANAKA and H. YAGI, “Technical Basis for Nuclear Magnetic Resonance Approach for Glycoproteins,” in *Experimental Approaches of NMR Spectroscopy*, The Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan, Ed., Springer Nature; Singapore, pp. 415–438 (2018).

K. KATO and T. SATOH, “Structural Insights on the Dynamics of Proteasome Formation,” *Biophys. Rev.* **10**, 597–604 (2018).

山口拓実, 渡邊東紀男, 矢木宏和, 加藤晃一, 「分子動力学計算とNMR 計測を用いた糖鎖の配座空間探索」, *J. Comput. Chem. Jpn.* **17**, 1–7 (2018).

矢木宏和, 加藤晃一, 「常磁性NMR 法と計算科学を組み合わせた糖鎖の動的コンホメーション解析」, *生化学* **90**, 198–202 (2018).

加藤晃一, 「糖鎖のコンフォメーション解析(1)」, 未来を創るグライコサイエンス——我が国のロードマップ——, 日本糖鎖科学コンソーシアム(JCGG)編, pp. 172–174 (2018).

T. YAMAGUCHI and K. KATO, “Molecular Dynamics of Gangliosides,” in *Gangliosides*, S. Sonnino and A. Prinetti, Eds., Methods in Molecular Biology, Humana Press; New York, **1804**, pp. 411–417 (2018).

K. KATO, H. YAGI and T. YAMAGUCHI, “NMR Characterization of the Dynamic Conformations of Oligosaccharides,” in *Modern Magnetic Resonance, 2nd Edition*, G. A. WEBB, Ed., Springer International Publishing, pp. 737–754 (2018).

加藤晃一, 谷中冴子, 「抗体のNMR 研究の趋向と展望」, *SAR News* **35**, 1–7 (2018).

H. YAGI, S. YANAKA and K. KATO, “Structure and Dynamics of Immunoglobulin G Glycoproteins,” in *Advances in experimental medicine and biology*, **1104**, 219–235 (2018).

T. SATOH and K. KATO, “Structural Aspects of ER Glycoprotein Quality-Control System Mediated by Glucose Tagging,” in *Advances in experimental medicine and biology*, **1104**, 149–169 (2018).

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」, *薬学雑誌* **138**, 1495–1502 (2018).

B-4) 招待講演

K. KATO, “Dynamical ordering in proteasome formation for creation of integrated functions,” The 6th International Symposium on Dynamical Ordering of Biomolecular Systems for Creation of Integrated Functions, 浜松, 2018年1月.

矢木真穂, 「NMR 分光法を基軸としたタンパク質の構造ダイナミクスと分子集合メカニズムの解明」, 日本薬学会第 138 年会, 金沢, 2018 年 3 月.

谷中冴子, 與語理那, 矢木宏和, 加藤晃一, 「抗体医薬の作動メカニズムの構造基盤」, 日本薬学会第 138 年会, 金沢, 2018 年 3 月.

谷中冴子, 與語理那, 矢木宏和, 加藤晃一, 「血清環境下における抗体の相互作用解析」, 第 18 回日本蛋白質科学会年会, 新潟, 2018 年 6 月.

K. KATO, “What is life? What is ExCELLS?” Frontier Bioorganization Forum 2018, 岡崎, 2018 年 7 月.

K. KATO and T. YAMAGUCHI, “Application of coordination chemistry approach to structural analysis of carbohydrate chains of biological interest,” 43rd International Conference on Coordination Chemistry, 仙台, 2018 年 8 月.

谷中冴子, 「部位選択的重水素化を活用した抗体の血清中での相互作用解析」, 第 19 回若手 NMR 研究会, 呉, 2018 年 8 月.

加藤晃一, 深瀬浩一, 秋吉一成, 千葉靖典, 門松健治, 「シンポジウム: 糖鎖関連大型研究の現状と将来展望」, 第 37 回日本糖質学会年会, 仙台, 2018 年 8 月.

加藤晃一, 「糖タンパク質の構造計測」, バイオ計測サイエンス研究部会第 1 回シンポジウム, 大阪, 2018 年 9 月.

S. YANAKA, H. WATANABE, R. YOGO, H. YAGI, T. UCHIHASHI and K. KATO, “Structural characterization of antibody interactions in situ,” 第 56 回日本生物物理学会年会, 岡山, 2018 年 9 月.

谷中冴子, 「抗体研究から学ぶこと」, 第 91 回日本生化学会大会生化学若い研究者の会創立 60 周年記念シンポジウム「生命科学の来し方行く末」, 京都, 2018 年 9 月.

加藤晃一, 「生命分子の動秩序形成と機能創発」, 第 1 回 ExCELLS シンポジウム, 岡崎, 2018 年 10 月.

加藤晃一, 「アルツハイマー病発症メカニズムを知る鍵, 「アミロイド線維」を宇宙実験でつくる」, 未来へのバイオ技術勉強会「宇宙と健康医療研究～抗加齢を中心に」, 東京, 2018 年 11 月.

加藤晃一, 「ExCELLS」, 教育研究評議会 (第 58 回) における研究発表, 東京, 2018 年 11 月.

K. KATO, “An integrative structural study of antibody,” The 6th International Symposium on Drug Discovery and Design by NMR, 横浜, 2018 年 11 月.

K. KATO, “In situ structural characterization of antibody interactions,” The 18th KIAS Conference on Protein Structure and Function, Seoul (Korea), November 2018.

M. YAGI-UTSUMI, “NMR structural analyses of molecular assembly of amyloid- β ,” The 2nd IMS-NANOTEC Joint Research Meeting, 岡崎, 2018 年 11 月.

B-6) 受賞, 表彰

加藤晃一, 日本薬学会奨励賞 (2000).

神谷由紀子, 特定領域研究「タンパク質の社会」全体班会議ポスター優秀賞 (2008).

西尾美穂, 第 73 回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2009).

神谷由紀子, 糖鎖科学名古屋拠点若手研究者奨励賞 (2009).

矢木真穂, 第 74 回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2010).

西尾美穂, 糖鎖科学名古屋拠点第8回「若手の力フォーラム」奨励賞 (2010).

加藤晃一, 日本薬学会学術振興賞 (2011).

矢木真穂, 第 11 回蛋白質科学会年会若手奨励賞 (2011).

山本さよこ, The International Symposium on Nuclear Magnetic Resonance 2011 (ISNMR 2011) 若手ポスター賞 (2011).

加藤晃一, 第 48 回ベルツ賞 1 等賞 (2011).

山口拓実, 日本化学会第 92 春季年会優秀講演賞 (学術) (2012).

Ying 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).

Ying 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).

Tong 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).

Arunima SIKDAR, The Winter School of Sokendai/ Asian CORE Program, Poster Presentation Award (2015).

Tong 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).

Tong 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).

與語理那, The 6th International Symposium of “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions” Poster Presentation Award (2018).

矢木真穂, 平成 30 年度日本薬学会奨励賞 (2018).

齋藤泰輝, ExCELLS Young Scientists Forum 2018, Poster Presentation Award (2018).

本田怜奈, 平成 30 年度糖鎖科学中部拠点奨励賞 (2018).

小藤加奈, 日本病院薬剤師会東海ブロック・日本薬学会東海支部合同学術大会 2018 ベストプレゼン賞 (2018).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメーシング学会評議員 (1995–), 理事 (2012–2016).

日本生化学学会評議員 (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), 会長 (2018–).

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 (2016–2018).

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 (2014–2016), 副支部長 (2015–2016).

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 回バイオイメージング学会組織委員・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).

国際磁気共鳴学会 2021 (ISMAR2021) 実行委員 (2018–).

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 (2013–2017).

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 (2016–2018), 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 (2016–2017).

日本学術会議連携会員 (2017–).

先端科学 (FoS) シンポジウム事業委員会委員 (2018–).

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 (2013–2017).

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ぶ! 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.

一般財団法人バイオインダストリー協会「未来へのバイオ技術」講演 (2018).

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」「物理系実習 II」「創薬科学・知的財産活用論」「特色科目 2 創薬と生命」, 2018 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」, 2018 年.

理化学研究所, 客員研究員, 2009 年 4 月–2018 年 3 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–.

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関連の探査」, 加藤晃一 (2008 年–2013 年).

科研費基盤研究(B), 「ポスト小胞体品質管理における細胞内レクチンの分子認識と超分子形成の構造基盤の解明」, 加藤晃一 (2009 年–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–2018 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-マクロ関連の探査と設計原理の探求」, 加藤晃一 (2013 年–2017 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–2018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–2018年).

宇宙航空研究開発機構「さほう」利用フィジビリティスタディ,「神経変性疾患の発症機構解明に向けた微小重力環境下でのアミロイド線維形成と性状評価」,加藤晃一(2016年).

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–2018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–2018年).

科研費若手研究,「抗体とFc受容体の新規相互作用様式の解明と抗体工学への展開」,谷中冴子(2018年–).

B-11) 産学連携

産業技術総合研究所,「酵母発現系での糖タンパク質の生産法」,加藤晃一(2018年).

太陽日酸(株),「タンパク質の安定同位体標識技術の開発」,加藤晃一(2018年).

C) 研究活動の課題と展望

今後は、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す。生命体を構成する多様な分子素子がダイナミックに秩序形成する仕組みを真に理解するためには、生体分子を取り巻く不均一かつ複雑な環境因子の影響を考慮することが必要不可欠である。現在、JAXAとの共同研究を通じて、国際宇宙ステーション「さほう」を利用して微小重力環境下においてアミロイド線維を形成し、それを用いた構造解析を実施している。さらに、極限環境において生命活動を司る分子集団の構造・動態・機能の解析を通じて生命の環境適応の機構を理解することを目指すとともに、動物細胞における分泌タンパク質の細胞内輸送と糖鎖修飾の連関の仕組みを探究する。

飯 野 亮 太（教授）（2014 年 6 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：生物物理学，分子モーター，分子機械，1 分子計測，構造解析，合理設計，網羅的変異導入，自動化

A-2) 研究課題：

- a) リニア分子モーターキチナーゼのエネルギー変換機構の解明
- b) 1 分子オングストローム計測法の開発とリニア分子モーターキネシンへの適用
- c) マルチカラー高速 1 分子計測法の開発
- d) 高速原子間力顕微鏡による脱凝集シャペロン ClpB の構造ダイナミクスの解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) プロセッシブキチナーゼ *SmChiA* 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。*SmChiA* を金ナノ粒子で標識し，全反射暗視野顕微鏡を用いて高い位置決定精度と時間分解能で 1 分子観測することで，キチン分解反応に伴う 1 nm 間隔のステップ運動を直接可視化することに初めて成功した。速度論的同位体効果を利用してキチンの分解に対応する時定数を決定し，運動中の反応素過程としては速く，律速段階ではないことを明らかにした。また，X 線結晶構造解析により運動中間体のキチン結合状態を明らかにし，さらに分子動力学シミュレーションを用いて *SmChiA* が直進運動する様子を解析した結果，キチンの脱結晶化が運動の律速段階であることを解明した。さらに，前進・後退の 1 nm ステップの割合と，反応時定数から計算される分解が起こる確率が同じであることから，*SmChiA* はレールであるキチンを切断し後退ステップのエネルギー障壁を上げることでブラウン運動（熱ゆらぎ）を前進に偏らせると結論づけた。言い換えると，*SmChiA* は Burnt-bridge 機構により一方向に運動するブラウニアンラチェットモーターであることを導き出した。
- b) 金ナノ粒子は，生体分子モーターが働く様子を，光学顕微鏡で 1 分子計測するためのプローブとして用いられている。光学顕微鏡による金ナノ粒子の観察における位置決定精度の原理的な限界を解明し，原子レベルの位置決定精度を達成することに成功した。また，金ナノ粒子からの信号光強度を高める輪帯照明型の全反射暗視野顕微鏡を構築し，マイクロ秒オーダーの時間分解能と原子レベルの位置決定精度を両立した。さらに開発した装置を用いて，生体内の長距離物質輸送を担うモータータンパク質キネシンの挙動を観察し，キネシンの足の動きを 10 マイクロ秒の時間分解能で詳細に追跡することに成功した。
- c) 金ナノ粒子，銀ナノ粒子，および金と銀の合金ナノ粒子をプローブとし，複数のレーザーと分光器を用いた多色同時散乱イメージング光学系を構築した。これにより，複数種の分子間の相互作用や分子内の構造変化を高速かつ高精度にイメージングできる 1 分子計測法を開発した。
- d) 高速原子間力顕微鏡（高速 AFM）を用い，凝集したタンパク質を再生する ClpB リングの構造変化を直接観察することに初めて成功した。ClpB リングの構造変化は，ネイティブ質量分析法，電子顕微鏡単粒子解析法，超遠心分析沈降速度法からも支持された。これらの結果より，ClpB のリングは ATP の結合・加水分解に応じて，円型・らせん型・ねじれた半らせん型と大きく構造変化することが明らかになった。また，変異型 ClpB を用いた解析により，これらの構造変化が脱凝集を引き起こす原動力となっていること，および ClpB が持つ 2 つの ATP 結合部位がそれぞれ固有の役割を担っていることを明らかにした。

B-1) 学術論文

- J. ANDO, A. NAKAMURA, A. VISOOTSAT, M. YAMAMOTO, C. SONG, K. MURATA and R. IINO**, “Single-Nanoparticle Tracking with Angstrom Localization Precision and Microsecond Time Resolution,” *Biophys. J.* **115**, 2413–2427 (2018). Doi: 10.1016/J.Bpj.2018.11.016
- K. FUJIMOTO, Y. MORITA, R. IINO, M. TOMISHIGE, H. SHINTAKU, H. KOTERA and R. YOKOKAWA**, “Simultaneous Observation of Kinesin-Driven Microtubule Motility and Binding of Adenosine Triphosphate Using Linear Zero-Mode Waveguides,” *ACS Nano* **12**, 11975–11985 (2018). Doi: 10.1021/Acsnano.8b03803
- J. TSUNODA, C. SONG, F. LICA IMAI, J. TAKAGI, H. UENO, T. MURATA, R. IINO and K. MURATA**, “Off-Axis Rotor in *Enterococcus Hirae* V-Atpase Visualized by Zernike Phase Plate Single-Particle Cryo-Electron Microscopy,” *Sci. Rep.* **8**, 15632 (10 pages) (2018). Doi: 10.1038/S41598-018-33977-9
- A. NAKAMURA, K. OKAZAKI, T. FURUTA, M. SAKURAI and R. IINO**, “Processive Chitinase is Brownian Monorail Operated by Fast Catalysis after Peeling Rail From Crystalline Chitin,” *Nat. Commun.* **9**, 3814 (12 pages) (2018). Doi: 10.1038/S41467-018-06362-3
- F. KAWAI, A. NAKAMURA, A. VISOOTSAT and R. IINO**, “Plasmid-Based One-Pot Saturation Mutagenesis and Robot-Based Automated Screening for Protein Engineering,” *ACS Omega* **3**, 7715–7726 (2018). Doi: 10.1021/Acsomega.8b00663
- T. UCHIHASHI, Y. H. WATANABE, Y. NAKAZAKI, Y. YAMASAKI, T. WATANABE, T. MARUO, S. UCHIYAMA, S. SONG, K. MURATA, R. IINO and T. ANDO**, “Dynamic Structural States of ClpB Involved in Its Disaggregation Function,” *Nat. Commun.* **9**, 2147 (12 pages) (2018). Doi: 10.1038/S41467-018-04587-W
- A. NAKAMURA, T. TASAKI, Y. OKUNI, C. SONG, K. MURATA, T. KOZAI, M. HARA, H. SUGIMOTO, K. SUZUKI, T. WATANABE, T. UCHIHASHI, H. NOJI and R. IINO**, “Rate Constants, Processivity, and Productive Binding Ratio of Chitinase A Revealed by Single-Molecule Analysis,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 3010–3018 (2018). DOI: 10.1039/C7CP04606E

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- K. FUJIMOTO, R. IINO, M. TOMISHIGE, H. SHINTAKU, H. KOTERA and R. YOKOKAWA**, “Fluorescent Observation of ATP Binding in Kinesin Driven Microtubule Gliding Using Nano-Slits,” *2018 IEEE Micro Electro Mechanical Systems (MEMS)*, 432–435 (2018).

B-3) 総説, 著書

- A. NAKAMURA and R. IINO**, “Visualization of Functional Structure And Kinetic Dynamics of Cellulases,” *Adv. Exp. Med. Biol.* **1104**, 201–217 (2018).
- R. IINO, S. SAKAKIHARA, Y. MATSUMOTO and K. NISHINO**, “Large-Scale Femtoliter Droplet Array for Single Cell Efflux Assay of Bacteria,” *Methods in Molecular Biology*, Springer, **1700**, 331–341 (2018).
- R. IINO, T. IIDA, A. NAKAMURA, E. SAITA, H. YOU and Y. SAKO**, “Single-Molecule Imaging and Manipulation of Biomolecular Machines and Systems,” *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1862**, 241–252 (2018).
- 飯野亮太, 「基礎講座：光学系構築・実践編 全反射蛍光顕微鏡 (TIRFM) による1分子イメージング」, *応用物理* **87(7)**, 531–535 (2018).

飯野亮太,「基礎講座：光学系構築・実践編 全反射蛍光顕微鏡 (TIRFM) を作ってみよう」, 応用物理 **87**(6), 442–446 (2018).

B-4) 招待講演

R. IINO, “Operation and Design Principles of Protein Molecular Motors,” The 2nd IMS-Nanotec Joint Research Meeting, Okazaki (Japan), November 2018.

R. IINO, “Commonalities and Disparities in Mechanisms of Protein Molecular Motors Revealed by Single-Molecule Imaging Analyses with Plasmonic Nanoprobes,” 1st SNU Evolutionary Materials Workshop, Seoul (Korea), October 2018.

R. IINO, “Single-Molecular Videography of Protein Molecular Motors,” Telluride Workshop on “Molecular Videography,” Telluride, Co (U.S.A.), September 2018.

R. IINO, “Molecular Engines: An Introduction,” The 79th Okazaki Conference: Synthetic, Biological, and Hybrid Molecular Engines, Okazaki (Japan), August 2018.

R. IINO, “Processive Chitinase is a Brownian Monorail Operated by Fast Catalysis after Peeling a Rail From Chitin Crystal,” Workshop on Molecules, Materials, Devices and Systems, Columbia University, New York (U.S.A.), May 2018.

R. IINO, “High-Speed Single-Molecule Imaging Analysis of Protein Molecular Motors with Plasmonic Nanoprobes,” Seminar in IBS Center for Molecular Spectroscopy and Dynamics, Korea University, Seoul (Korea), April 2018.

J. ANDO, “High-speed, high-precision, multi-color imaging of single biomolecules with plasmonic nanoprobes,” APC 2018, 10th Asian Photochemistry Conference, The 4th International Symposium on Frontiers in Bioimaging, Taipei (Taiwan), December 2018.

J. ANDO, “High-speed, high-precision, multi-color imaging of single biomolecules with plasmonic nanoprobes,” SENDAI 2018, An update on molecular motors: Open challenges and new perspectives, Sendai (Japan), November 2018.

J. ANDO, “High-speed, high-precision single-molecule imaging of dynein with plasmonic nanoprobes,” The 79th Okazaki Conference: Synthetic, Biological, and Hybrid Molecular Engines, Okazaki (Japan), September 2018.

A. NAKAMURA, “Processive chitinase is Brownian ratchet moving unidirectionally by fast catalysis,” SENDAI 2018, An update on molecular motors: Open challenges and new perspectives, Sendai (Japan), November 2018.

A. NAKAMURA, “Direct observation of 1 nm steps of a “burnt-bridge” Brownian ratchet SmChiA on crystalline chitin with gold nanoprobe,” The 79th Okazaki Conference: Synthetic, Biological, and Hybrid Molecular Engines, Okazaki (Japan), August 2018.

A. NAKAMURA, “Resolving 1 nm steps of a Brownian-ratchet chitinase with gold nano particle,” International Symposium on Molecular Science—Physical Chemistry/Theoretical Chemistry, Chemoinformatics, Computational Chemistry—Cosponsored by Japan Society for Molecular Science, Funabashi (Japan), March 2018.

飯野亮太,「タンパク質分子モーターにとって協調性とは?」, 第7回発動分子科学セミナー, 東京工業大学, 横浜, 2018年11月.

飯野亮太,「バイオマス多糖を効率的に分解する生体分子モーターの作動原理」, 高分子討論会, 北海道大学, 札幌, 2018年9月.

飯野亮太,「プラズモニクナノプローブを用いた生体分子の時分割1分子イメージング」, 物理学会秋季大会, 同志社大, 京田辺, 2018年9月.

飯野亮太,「生体・人工分子マシンの共通原理の理解を目指して」, AMO 討論会, 東北大学, 仙台, 2018年6月.

飯野亮太,「タンパク質分子モーターの協調性とは?」, 情報通信研究機構未来ICT研究所, 未来ICT研究所, 神戸, 2018年4月.

飯野亮太,「タンパク質分子モーターの作動原理と設計原理の理解に向けて」,第4回生体分子科学シンポジウム,京都大学,京都,2018年2月.

中村彰彦,「キチン加水分解酵素はATPを使わずに運動するブラウニアンラチェットである」,分子モーター討論会,東京大学,東京,2018年11月.

中村彰彦,「キチン加水分解酵素は速い加水分解でブラウン運動を制御する」,多糖の未来フォーラム,京都大学,京都,2018年11月.

B-6) 受賞,表彰

中村彰彦,第32回セルラーゼ研究会ポスター賞(2018).

飯田龍也,日本生物物理学会中部支部講演会最優秀発表賞(2018).

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

日本生物物理学会代議員(2014–2016).

日本生物物理学会分野別専門委員(A-13. モータータンパク質)(2014).

日本生物物理学会分野別専門委員(E-04. タンパク質工学)(2016).

日本分光学会中部支部幹事(2017.10–). (安藤 潤)

日本生物物理学会分野別専門委員(E-04. タンパク質工学)(2018).

学会の組織委員等

第25回日本バイオイメーシング学会学術集会副大会長(2016).

学会誌編集委員

日本生物物理学会学会誌「生物物理」編集委員(2014–2015).

Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, Associate Editor (2015.4.29–).

その他

公益財団法人新世代研究所バイオ単分子研究会委員(2012.4.2–2018.3).

日本生物物理学会小中高校への講師派遣サポート事業講師(2016.11–).

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

名古屋大学大学院理学研究科,客員教授,2018年–.

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域研究「発動分子科学」(計画研究),「生体・人工発動分子によるエネルギー変換過程の1分子計測法の開発」,飯野亮太(2018年–2022年).

科研費基盤研究(B),「生体1分子オングストローム計測法の開発」, 飯野亮太 (2018年–2020年).

科研費新学術領域研究「レゾナンスバイオ」(公募研究),「プラズモニクナノ粒子を用いたマルチカラー1分子観察法の開発」, 飯野亮太 (2018年).

科研費基盤研究(B),「金属ナノ粒子によるタンパク質ドメインの高速高精度イメージング技術の開発」, 安藤潤 (2018年–2020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,「独立に進化した動物・植物・微生物の糖質消化システムを分子機能構造から読み解く」, 中村彰彦 (2018年).

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ジ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分子イメージング法の開発」, 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ジ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ーグリニア分子モーターの創生」, 飯野亮太 (2016年–2017年).

科研費新学術領域研究「柔らかな分子系」(公募研究),「金属ナノプローブを用いた分子モーターの運動と構造変化の高速1分子計測」, 飯野亮太 (2016年–2017年).

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ジングサイエンス研究分野プロジェクト,「金ナノロッドの高速高精度光学イメージングによる生体分子モーターの複合1分子計測」, 飯野亮太 (2015年).

科研費基盤研究(B),「ナトリウムイオン輸送性 V-ATPase のエネルギー変換機構の解明」, 飯野亮太 (2015年–2017年).

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 駆動サイボーグ回転分子モーターの創生」, 飯野亮太 (2014年–2015年).

科研費新学術領域研究「柔らかな分子系」(公募研究),「金ナノロッドを用いた分子モーター構造ダイナミクスの高速1分子計測」, 飯野亮太 (2014年–2015年).

科研費特別研究員奨励費,「ダブルドメインセルラーゼの吸着バランス制御による結晶性多糖構造分解反応の促進」, 中村彰彦 (2013年–2014年).

科研費基盤研究(B),「リニアモータータンパク質糖質加水分解酵素の1ナノメートルステップの1分子計測」, 飯野亮太 (2012年–2014年).

科研費挑戦的萌芽研究,「生体・人工ハイブリッドナノモーターの創製」, 飯野亮太 (2012年–2013年).

科研費新学術領域研究「揺らぎと生体機能」(公募研究),「分子モーターの構造揺らぎを調べる超高速配向イメージング法の開発」, 飯野亮太 (2011年–2012年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究),「生細胞内1分子 FRET 法による回転モータータンパク質のダイナミクス計測」, 飯野亮太 (2010年–2011年).

科研費新学術領域研究「揺らぎと生体機能」(公募研究),「モータータンパク質の揺らぎと性能の相関を調べる超高速光学顕微鏡の開発」, 飯野亮太 (2009年–2010年).

科研費若手研究(B),「プロトン駆動力で回転するATP合成酵素を1分子技術とマイクロデバイスで可視化する」, 飯野亮太 (2009年–2010年).

科研費若手研究(B),「プロトン駆動力で回転する生体分子モーター ATP合成酵素の1分子計測」, 飯野亮太 (2006年–2008年).
日本学術振興会二国間交流事業共同研究,「生細胞内で働くATP合成酵素の回転速度を1分子技術で計測する」, 飯野亮太 (2010年–2011年).

大阪大学産業科学研究所リーダーシップ支援経費,「1細菌培養・観察・回収用マイクロドロップレットアレイの開発」, 飯野亮太 (2009年).

C) 研究活動の課題と展望

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。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。また, 先端的生体1分子計測法の開発として, 金・銀ナノ粒子を用いた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の位置決定精度と時間分解能の改善, 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。さらに, ロボットを用い, タンパク質分子モーター変異体の網羅的機能スクリーニングの自動化を行う。

栗原 顕 輔（特任准教授）（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) アミノ酸重合と液-液相分離型液滴の自発的形成の協奏
- b) 粒子内包型ベシクルにみる偏在現象と自己再生産モデルの構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 前生物的環境において原始細胞の境界が，情報分子である核酸やペプチドといった重合体と，どのように協奏し進化してきたかについては未解明である。我々はこのようなモデル原始細胞の構築を目的とし，還元的雰囲気の水中で自発的にペプチドを重合しうる，ジスルフィドとチオエステル部位を有したモノマー前駆体を設計合成した。ペプチドが水中で自発的に形成されるとともに，反応進行にともない細胞サイズの液滴の形成が見出された。水中で自発的に重合したペプチドが，その反応過程で脱離した疎水性分子と水との界面を安定化させることで分子集合体を形成したと考えられる。
- 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る。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，コロイド粒子を稠密に内包するベシクルを調製した。粒子がベシクル内膜でサイズの違いに応じて偏在する現象を，枯渇効果および浸透圧平衡に基づくモデルを構築して議論した。さらに発展系として，このコロイド粒子内包ベシクルを用いた自己再生産ベシクルの構築に成功した。

B-1) 学術論文

Y. NATSUME, K. KOMORI, K. ITOH and K. KURIHARA, “Spontaneous Localization of Two Kinds of Hard Spheres in Giant Vesicles,” *Trans. Mater. Res. Soc. Jpn.* **43**[6], 333–338 (2018).

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 (2018).

B-4) 招待講演

栗原顕輔, 「原始的なタンパク質を内包する原始細胞モデルの創成」, アストロバイオロジーセンター若手ワークショップ, 東京, 2018年2月.

栗原顕輔, 「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」, 第6回宇宙における生命ワークショップ, 東京, 2018年2月.

栗原顕輔, 「構成生物学的アプローチで迫る人工細胞の創成」, 野口遵研究助成金講演会, 東京, 2018年3月.

栗原顕輔, 「構成生物学的アプローチで迫る人工細胞構築」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー：再構成アプローチが開拓する生体膜・膜タンパク質研究の最前線, 大阪, 2018年3月.

栗原顕輔,「柔らかい分子集合体からなる原始細胞モデルの研究」, 公益財団法人クリタ水・環境科学振興財団研究優秀賞式典, 東京, 2018年8月.

B-6) 受賞, 表彰

栗原顕輔, クリタ水・環境科学研究優秀賞 (2018).

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).

職場体験学習受入岡崎市立竜海中学校 (2018).

出前授業「中学生のためのサイエンスセミナー 化学で生命を創る!？」岡崎市立福岡中学校 (2018).

自然科学研究機構広報誌OKAZAKI 第57号取材 (2018).

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」, 2018年10月-11月.

B-10) 競争的資金

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).

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).

クリタ水環境科学振興財団水を究める研究助成,「分子システムから迫る細胞内の水の意義」, 栗原顕輔 (2018年-2019年).

油脂工業会館研究助成,「ペプチド合成系を内包する自己再生産ベシクルの構築」, 栗原顕輔 (2018年-2019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).

中部科学技術センター学術奨励研究助成,「ドラッグデリバリーシステムを指向したオリゴペプチド内包リポソームの開発」, 栗原顕輔 (2016年-2017年).

クリタ水環境科学振興財団萌芽研究助成,「原始海洋に誕生した細胞モデルの研究」, 栗原顕輔 (2016年-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,「リビッドワールド仮説に基づく原始細胞モデルの基礎研究」, 栗原顕輔 (2016年-2017年)

クリタ水環境科学振興財団萌芽研究助成,「生命誕生における水の汚れの重要性」, 栗原顕輔 (2015年-2016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 (2015年-2016年).

日本科学協会笹川科学研究助成,「自己増殖するベシクル型人工細胞を用いた生命起源解明への挑戦」, 栗原顕輔 (2015年–2016年).

豊秋奨学会海外渡航費助成,「内部で触媒システムを生成する人工細胞の構築」, 栗原顕輔 (2015年).

野口研究所野口遵研究助成,「ドラッグデリバリーシステムを志向した自律構築型リポソームの開発」, 栗原顕輔 (2014年–2016年).

C) 研究活動の課題と展望

課題a)について我々はすでに, 反応溶液に対する剪断処理と膜分子前駆体添加を繰り返すことで, 液–液相分離した液滴が自己再生産ダイナミクスを示すことを明らかにしている。この自己再生産液滴は, 2本鎖DNAを濃縮する特性があることも共焦点レーザー走査型蛍光顕微鏡で観測した。今後は, 生命起源において, 自発的な重合反応と液滴形成の協奏が核酸やペプチドを濃縮し, 反応場として機能し得たことについてさらに検討・発展させたい。一方で課題b)の人工細胞モデルが増殖するためには, 栄養を取り込んで自己再生産することが必要である。我々は, 内部にポリスチレンビーズを含むリン脂質ベシクルに脂肪酸を添加することで, ベシクル膜内における膜分子数が増大して分裂するという単純なモデルを構築することに成功した。またビーズ内包率に応じて分裂挙動が変わることも見いだした。現在, ベシクル膜面積増加と内部粒子の特定の体積分率という, 二つの条件が揃ったときの分裂について議論している。今後は, 内部粒子の変換や分裂挙動のシミュレーションモデルの構築などを行う予定である。

倉 橋 拓 也 (助教) (2002 年 6 月 15 日着任)

A-1) 専門領域：錯体化学，触媒化学

A-2) 研究課題：

- a) 酸素酸化反応の開発を目的とする酸素分子活性化の錯体化学研究
- b) 超微細気泡を反応場とするメタン光酸化触媒の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 大気中の酸素分子は最も理想的な酸化剤であり，物質合成に加えて汚染物質の酸化分解等への応用が期待される。しかしながら酸素分子を酸化剤とする強力な酸化反応の例は極めて限られている。アルカリ水溶液との反応をトリガーとして酸素分子を活性化する新規手法の開発を目的として，水酸化物イオンと金属錯体触媒の反応を検討してきた。これまでの研究で水酸化物イオンの結合した金属イオンは酸化還元電位が大きく低下して，酸化されやすくなっていることを見出した。本年度は，金属イオンの周りの有機配位子に光触媒機能を導入して，金属イオンを逐次一電子酸化して酸化触媒活性につなげることを検討した。
- b) 基礎的な錯体化学研究で得られた知見を基盤にして，酸素分子のみを反応試薬とする光酸化触媒を開発して，コスト競争力が要求されるメタンの化学変換に応用する。ガス状基質に適した反応場の開発も本研究の主要課題の一つに位置づけており，この目的のため水溶液中で発生させたメタン－酸素混合ガスの超微細気泡の活用を検討する。本年度は，加圧条件で超微細気泡を発生させるための装置設計と製作を行って，条件検討を進めた。

B-1) 学術論文

T. KURAHASHI, “Drastic Redox Shift and Electronic Structural Changes of Manganese(III)-Salen Oxidation Catalyst upon Reaction with Hydroxide and Cyanide Ion,” *Inorg. Chem.* **57**, 1066–1078 (2018).

B-6) 受賞，表彰

T. KURAHASHI and H. FUJII, BCSJ Award Article (2012).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本化学会第 93 春季年会総務小委員会委員 (2014).

B-8) 大学での講義，客員

長崎県立大学看護栄養学部，クロスアポイントメント，2018 年．

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「高原子価マンガンオキソ錯体の精密反応制御」, 倉橋拓也 (2011 年–2015 年).

内藤記念科学奨励金・研究助成, 「コバルト錯体を助触媒とする酸素酸化反応の開発」, 倉橋拓也 (2015 年–2017 年).

科研費基盤研究(C), 「低原子価金属オキソ錯体を鍵活性種とする酸素分子の活性化」, 倉橋拓也 (2015 年–2018 年).

科学技術振興機構さきがけ研究, 「超微細気泡を反応場とするメタン光酸化触媒の開発」, 倉橋拓也 (2017 年–2021 年).

生体分子情報研究部門

古 谷 祐 詞（准教授）（2009 年 3 月 1 日～2018 年 9 月 30 日）*¹⁾

A-1) 専門領域：生物物理学, 生体分子科学

A-2) 研究課題：

- a) 哺乳動物カリウムイオンチャネルのイオン透過性制御機構
- b) G タンパク質共役受容体のリガンド結合に伴う構造変化の赤外分光解析
- c) 動物のオプシンが示す多様なシグナル伝達特性
- d) マグネシウムチャネルの Mg^{2+} イオン選択の分子機構

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 細胞内外には、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）のはたらきで電位差（静止膜電位）が生じている。TWIK-1 というカリウムチャネルは、「適度」にナトリウムイオンも透過することで、静止膜電位を微調節している。これまでに TWIK-1 のカリウム選択性が「緩い」原因を解明するために、生化学的に TWIK-1 のイオン透過性を解析し、イオン交換に伴う赤外吸収スペクトルの変化から、カリウムチャネルのイオン選択性を生み出す領域でのカリウムイオンへの親和性が低くなっていることを見出していた。さらに得られた赤外分光データを、琉球大学の東雅大助教との共同研究による基準振動計算の結果と合わせて解釈することにより、TWIK-1 の動的構造変化とイオン選択性が関連しているようすを明確に示した。これら得られた結果をまとめて、*J. Biol. Chem.* 誌に発表した。
- b) G タンパク質共役受容体（GPCR）は、細胞外のシグナルを、三量体 G タンパク質を介して伝達するはたらきを持ち、感覚・神経伝達・ホルモン受容など重要な生命機能を担うとともに、主要な創薬ターゲットにもなっている。現在、X線結晶構造解析やクライオ電顕解析などにより、GPCR の静的構造は非常に数多く解明されているが、機能発現に伴うタンパク質ダイナミクスについての理解は乏しい。そこで、静的構造情報が最も豊富な GPCR の一つ A2A アデノシン受容体について、生理的リガンドであるアデノシンの結合に伴う赤外吸収スペクトルの変化を解析することに取り組んだ。その結果、アデノシン結合に伴うスペクトル変化を精度よく計測することに成功した。このスペクトル変化には受容体タンパク質の構造変化由来の成分だけでなく結合したリガンドに由来するものも含まれている。そこで、同位体標識したアデノシンが結合した際のスペクトル変化も計測して、結果を比較することで、両成分を分離することができた。
- c) ヒトを含めた動物は、外界の光情報を視覚や生体リズムの調節などに利用している。これらの光受容機能の多くにおいて、オプシンと呼ばれる GPCR が最初に光シグナルをキャッチする役割を担っている。これまでに、様々な動物の特に眼以外の組織ではたらくオプシン類の分光学的・生化学的・電気生理学的特性を解析してきた。その結果、オプシンの種類によっては、複数の種類の G タンパク質を活性化するものがあり、その相対的な活性が動物種ごとに大きく異なることや、G タンパク質を介したシグナル伝達には α サブユニットと $\beta\gamma$ サブユニット由来の2つの経路があるが、 $\beta\gamma$ サブユニット経路を選択的に駆動するものがあることを見出した。
- d) マグネシウムイオンを選択的に透過するマグネシウムチャネル MgtE の全反射赤外分光と量子化学計算（琉球大学東雅大助教）を組み合わせることで、 Mg^{2+} と Ca^{2+} とのマグネシウム透過孔での水和状態の違いについて解析した。

その結果、 Mg^{2+} は水和された状態で安定に存在する一方、 Ca^{2+} は容易に水和構造が崩れ、イオン透過孔のイオン選択フィルターと考えられている Asp432 と結合することが明らかとなった。Asp432 を Glu に変異するだけで、水和された Mg^{2+} の結合が阻害されるなど、イオン透過孔が Mg^{2+} を選択する精妙な分子機構を明らかにした。これらの結果をまとめて、*J. Phys. Chem. B* 誌に発表した。

B-1) 学術論文

K. KATAYAMA, Y. FURUTANI, M. IWAKI, T. FUKUDA, H. IMAI and H. KANDORI, ““*In situ*” Observation of Role of Chloride Ion Binding to Monkey Green Sensitive Visual Pigment by ATR-FTIR Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 3381–3387 (2018).

A. SUEA-NGAM, M. SRISA-ART and Y. FURUTANI, “PDMS-Based Microfluidic Device for Infrared-Transmission Spectro-Electrochemistry,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **91**, 728–734 (2018).

H. TSUKAMOTO, M. HIGASHI, H. MOTOKI, H. WATANABE, C. GANSER, K. NAKAJO, Y. KUBO, T. UCHIHASHI and Y. FURUTANI, “Structural Properties Determining Low K^+ Affinity of the Selectivity Filter in the TWIK1 K^+ Channel,” *J. Biol. Chem.* **293**, 6969–6984 (2018).

T. KIMURA, V. A. LORENZ-FONFRIA, S. DOUKI, H. MOTOKI, R. ISHITANI, O. NUREKI, M. HIGASHI and Y. FURUTANI, “Vibrational and Molecular Properties of Mg^{2+} Binding and Ion Selectivity in the Magnesium Channel MgtE,” *J. Phys. Chem. B* **122**, 9681–9696 (2018).

B-3) 総説、著書

Y. FURUTANI, “Ion–protein Interactions of a Potassium Ion Channel Studied by Attenuated Total Reflection Fourier Transform Infrared Spectroscopy,” *Biophys. Rev.* **10**, 235–239 (2018).

B-4) 招待講演

Y. FURUTANI, “Interactions of potassium ion channels with alkali metal cations and their relevance to the K^+ selectivity studied by infrared spectroscopy,” Mini international workshop “Interhierarchical understanding of materials and life through molecular observation,” Institute for Molecular Science, Okazaki (Japan), March 2018.

古谷祐詞, 「赤外分光法によるイオンタンパク質間相互作用の解析」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー「構造情報に基づいた膜イオン輸送タンパク質の生理機能の解明に向けて」, 大阪大学蛋白質研究所, 吹田, 2018年9月.

Y. FURUTANI and H. TSUKAMOTO, “Light-induced difference infrared spectroscopy on the photochromic reaction of a ciliary opsin by irradiation of ultraviolet and visible light,” 18th International Conference on Retinal Proteins, Hockley Valley Resort, Ontario (Canada), September 2018.

Y. FURUTANI, “Infrared spectroscopy for analyzing ion-protein interactions of ion channels,” The 49th National Institute for Physiological Sciences (NIPS) international symposium “Ion channels: looking back, seeing ahead,” Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), December 2018.

B-6) 受賞、表彰

古谷祐詞, 平成19年度名古屋工業大学職員褒賞優秀賞 (2007).

古谷祐詞, 平成 24 年度分子科学研究奨励森野基金 (2012).

古谷祐詞, 第6回 (2013 年度) 分子科学会奨励賞 (2013).

古谷祐詞, 木村哲就, 岡本基士, 第1回 BIOPHYSICS Editor's Choice Award (2014).

古谷祐詞, 清水啓史, 浅井祐介, 老木成稔, 神取秀樹, 第3回 Biophysics and Physicobiology Editor's Choice Award (2016).

塚本寿夫, 平成 24 年度日本生物物理学会中部支部講演会優秀発表者 (2013).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会理事 (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 回レチナー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-10) 競争的資金

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究), 「孤立ナノ空間に形成された水クラスターの水素結合ダイナミクス解析」, 古谷祐詞 (2008 年–2009 年).

科研費特定領域研究「革新的ナノバイオ」(公募研究), 「光駆動イオン輸送蛋白質の動作機構の解明」, 古谷祐詞 (2009 年–2010 年).

科研費特定領域研究「細胞感覚」(公募研究), 「古細菌型ロドプシンの新奇情報伝達機構の解明と光応答性カリウムチャネルの開発」, 古谷祐詞 (2009 年–2010 年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究), 「孤立ナノ空間を有する有機金属錯体での特異な光化学反応の分光解析」, 古谷祐詞 (2010 年–2011 年).

科研費若手研究(B), 「赤外差スペクトル法によるイオン輸送蛋白質の分子機構解明」, 古谷祐詞 (2010 年–2011 年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「膜輸送蛋白質によるイオン選択・透過・輸送の分子科学」, 古谷祐詞 (2010 年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「イオンチャネル蛋白質のイオン認識および開閉制御の分子機構解明」, 古谷祐詞 (2011 年).

科学技術振興機構さきがけ研究,「様々な光エネルギー変換系における水分子の構造・機能相関解明」, 古谷祐詞 (2011年–2014年).

科研費挑戦的萌芽研究,「哺乳動物イオンチャネルの機能的発現と分子機構解析」, 古谷祐詞 (2012年–2013年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「イオンチャネル蛋白質の物理・化学刺激によるゲート開閉の分子機構解明」, 古谷祐詞 (2013年).

科研費挑戦的萌芽研究,「膜電位存在下での膜タンパク質の赤外分光解析系の開発」, 古谷祐詞 (2014年–2016年).

科研費若手研究(A),「膜タンパク質の分子機構解明に資する新規赤外分光計測法の開発」, 古谷祐詞 (2014年–2017年).

総合研究大学院大学学融合推進センター公募型研究事業事業枠II「学融合共同研究」,「動物が「見えない光」を受容するメカニズム——化学と生理学を融合したアプローチ——」, 古谷祐詞 (2015年–2016年).

ノバルティス科学振興財団研究奨励金,「部位特異的蛍光標識を用いたGタンパク質共役受容体の動的構造変化の解析」, 塚本寿夫 (2012年).

科研費若手研究(B),「哺乳動物が環境光を感知するためのメラノプシンの分子特性の解明」, 塚本寿夫 (2013年–2014年).

上原記念生命科学財団研究奨励金,「メラノプシンを用いたカルシウムシグナリングの光制御」, 塚本寿夫 (2015年).

科研費若手研究(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

カリウムイオンチャネルTWIK1のイオン選択フィルターの分子振動解析を全反射赤外分光計測および量子化学計算(琉球大学 東雅大助教)により明らかにし, 1680 cm^{-1} にフィルターの“分子指紋”となる特徴的な分子振動を同定した。また, マグネシウムチャネルMgtEについても, 全反射赤外分光計測と量子化学計算との組み合わせにより, Mg^{2+} が水和された状態でイオン透過孔に存在することなどを明らかにした。名古屋工業大学に転出後はこれらの成果をもとに様々な膜タンパク質に赤外分光計測を適用することで, 膜タンパク質の多様な機能発現の分子機構を明らかにしていきたい。塚本寿夫助教も昨年度に採択されたさきがけ研究のテーマを着実に進めながら, さらなる飛躍を目指しているところである。

*) 2018年10月1日名古屋工業大学工学部准教授

錯体触媒研究部門

魚 住 泰 広（教授）（2000 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：有機合成化学，有機金属化学

A-2) 研究課題：

- a) 不均一反応メディア中での触媒反応システムの構築
- b) 自己集積型金属錯体触媒の設計・開発
- c) 新しい遷移金属錯体触媒・ナノ構造触媒の創製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) パラジウム，ロジウム，銅錯体触媒などを両親媒性高分子に固定化するとともに機能修飾することで，これら遷移金属錯体触媒有機変換工程の多くを完全水系メディア中で実施することに成功した。水中不均一での高立体選択的触媒反応の開発を世界にさがけて成功した。
- b) 金属架橋高分子の自己集積触媒（架橋構造と触媒機能のハイブリッド）を開発し，さらにマイクロ流路内の層流界面での自己集積錯体触媒膜の創製に成功した。前項で開発した高分子触媒をカラムカートリッジ化することで実用性に富む連続フロー反応システムを構築した。
- c) 新しいピンサー錯体の合成方法論を確立し，それらピンサー錯体分子が自発的に集積することで形成する分子集合体の三次元高次構造に立脚した新しい触媒機能システムの開拓に注力しつつある。
- d) 水中での反応加速，連続フローシステムに依る効率化，ピンサー錯体触媒化学における新しい反応形式などに立脚して各種反応の ppm-ppb 触媒化を進めつつある。

B-1) 学術論文

Y. HIRAI and Y. UOZUMI, “Preparation of Aryl(dicyclohexyl)phosphines by C–P Bond-Forming Cross-Coupling in Water Catalyzed by an Amphiphilic-Resin-Supported Palladium Complex,” *Synlett* **28**, 2966–2970 (2017).

A. OHTAKA, A. SAKON, A. YASUI, T. KAWAGUCHI, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA and R. NOMURA, “Catalytic Specificity of Linear Polystyrene-Stabilized Pd Nanoparticles during Ullmann Coupling Reaction in Water and the Associated Mechanism,” *J. Organomet. Chem.* **854**, 87–93 (2018).

R. HUDSON, H. R. ZHANG, A. LOTEMPLIO, G. BENEDETTO, G. HAMASAKA, Y. M. A. YAMADA, J. L. KATZ and Y. UOZUMI, “Poly(meta-phenylene oxides) for the Design of a Tunable, Efficient, and Reusable Catalytic Platform,” *Chem. Commun.* **54**, 2878–2881 (2018).

D. PI, H. ZHOU, Y. ZHOU, Q. LIU, R. HE, G. SHEN and Y. UOZUMI, “Cu-Catalyzed Reduction of Azaarenes and Nitroaromatics with Diboronic Acid as Reductant,” *Tetrahedron* **74**, 2121–2129 (2018).

G. HAMASAKA, S. ICHII and Y. UOZUMI, “A Palladium NNC-Pincer Complex as an Extremely Efficient Catalyst Precursor for the Mizoroki–Heck Reaction,” *Adv. Synth. Catal.* **360**, 1833–1840 (2018).

S. PAN, Y. SHUO, T. OSAKO and Y. UOZUMI, “Controlled Aerobic Oxidation of Primary Benzylic Alcohols to Aldehydes Catalyzed by Polymer-Supported Triazine-Based Dendrimer–Copper Composites,” *Synlett* **29**, 1152–1156 (2018).

G. SHEN, T. OSAKO, M. NAGAOSA and Y. UOZUMI, “Aqueous Asymmetric 1,4-Addition of Arylboronic Acids to Enones Catalyzed by an Amphiphilic Resin-Supported Chiral Diene Rhodium Complex Under Batch and Continuous-Flow Conditions,” *J. Org. Chem.* **83**, 7380–7387 (2018).

D. CHEN, Y. ZHOU, H. ZHOU, S. LIU, Q. LIU, K. ZHANG and Y. UOZUMI, “Metal-Free Reduction of Nitro Aromatics to Amines with $B_2(OH)_4/H_2O$,” *Synlett* **29**, 1765–1768 (2018).

A. OHTAKA, M. KAWASE, S. AIHARA, Y. MIYAMOTO, A. TERADA, K. NAKAMURA, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI and O. SHINAGAWA, “Poly(tetrafluoroethylene)-Stabilized Metal Nanoparticles: Preparation and Evaluation of Catalytic Activity for Suzuki, Heck, and Arene Hydrogenation in Water,” *ACS Omega* **3**, 10066–10073 (2018).

A. OHTAKA, S. FUKUI, A. SAKON, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA and R. NOMURA, “Linear Polystyrene-Stabilized Rh(III) Nanoparticles for Oxidative Coupling of Arylboronic Acids with Alkenes in Water,” *J. Organomet. Chem.* **873**, 1–7 (2018).

T. OSAKO, M. NAGAOSA, G. HAMASAKA and Y. UOZUMI, “Asymmetric Copper-Catalyzed C(sp)–H Bond Insertion of Carbenoids Derived from N-Tosylhydrazones,” *Synlett* **29**, 2251–2256 (2018).

M. MINAKAWA, K. WATANABE, S. TOYODA and Y. UOZUMI, “Iridium-Catalyzed Direct Cyclization of Aromatic Amines with Diols,” *Synlett* **29**, 2385–2389 (2018).

B-3) 総説, 著書

Y. UOZUMI and G. HAMASAKA, “Ligand-Introduction Synthesis of NCN Pincer Complexes and their Chemical Properties,” in *Pincer Compounds. Chemistry and Applications*, 634–672 (2018).

D. ROY and Y. UOZUMI, “Recent Advances in Palladium-Catalyzed Cross-Coupling Reactions at ppm to ppb Molar Catalyst Loadings,” *Adv. Synth. Catal.* **360**, 602–625 (2018).

B-4) 招待講演

Y. UOZUMI, 「雨宿り効果」に立脚した超機能性固定化触媒の創成, 日本プロセス化学会 2018 サマーシンポジウム, 東京 (日本), 2018年7月.

Y. UOZUMI, “Green Organic Transformations in Water with Heterogeneous Catalysts,” The 8th IUPAC International Conference on Green Chemistry, Bangkok (Thailand), September 2018.

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, 第30回若い世代の特別講演会特別講演証 (2016).
大迫隆男, Thieme Chemistry Journal Award (2017).
浜坂 剛, 有機合成化学協会三菱ガス科学研究企画賞 (2017).
浜坂 剛, 第32回若い世代の特別講演会特別講演証 (2018).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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–).
有機金属討論会組織委員 (2012–).
4th International Symposium on C–H Activation, International Committee (2018).
14th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Organizing Committee (2018).
43rd International Conference on Coordination Chemistry, National Organizing Committee (2018).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会第116委員会委員 (1998–).
科学技術振興機構CREST 研究「革新的触媒」領域アドバイザー (2015–).

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 (2007–2017).
経済産業省グリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発プロジェクト 研究チームリーダー (2008–2012).
科学技術振興機構CREST 研究「反応媒体駆動原理の確立と革新的触媒プロセスの開発」 研究副リーダー (2011–2016).
科学技術振興機構ACCEL 研究「超活性固定化触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底効率化」 研究代表 (2014–2019).
理化学研究所 JST-ACCEL 研究ディレクター (2018–2019).
総合研究大学院大学物理科学研究科長 (2018–2020).

B-8) 大学での講義, 客員

Three Gorges University (三峡大学・中国), 疎天学者講座教授, 2013年–2018年.

B-10) 競争的資金

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–).

科学費若手研究(B), 「高活性NNC-ピンサー型錯体を活用した痕跡触媒量での有機分子変換工程開発」, 浜坂剛 (2017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。なかでも最近では未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。

檜 山 儀 恵 (准教授) (2014 年 6 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

- a) プロトンあるいはヨードニウムを触媒とする不斉骨格転位反応の開発
- b) キラルプレnstेटド酸触媒ならびにキラル有機ルイス酸触媒の開発
- c) ヨウ化ペルフルオロアリールを母骨格とするハロゲン結合供与体触媒の開発
- 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) 三中心四電子ハロゲン結合を活用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全フッ素化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) プレンステッド酸触媒存在下、エン - 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 ならびに鈴木グループとの共同研究、ナノプラット結晶スポンジ法の利用により、本反応の反応機構を明らかにした。
- b) プロトンあるいはヨードニウムを活性中心とするキラルプレnstेटド酸触媒あるいはキラル有機ルイス酸触媒の合成に成功した。さらに、ピナフタレン骨格を有するキラルプレnstेटド酸触媒をエン - アルジミンの形式的 1,3- 転位反応の触媒として用いたところ、中程度のエナンチオ選択性を与えた。開発した触媒の有用性を明らかにした。
- 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、岡山大自然生命科学研究支援センターでの HOESY 測定により、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やジアリールヨードニウムトリヨードの合成と単結晶 X 線回折に成功した。また、合成した錯体が、向山アルドール反応や細見 - 櫻井反応において、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。構成素子となる部分フッ素化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が得られた。

B-4) 招待講演

檜山儀恵, 「非金属錯体触媒による医薬品構成素子合成法の開発」, アステラス病態代謝研究会第 49 回報告会, 日本工業倶楽部, 東京, 2018 年 10 月.

檜山儀恵, 「ハロゲン結合を活用する有機分子変換システム創成への挑戦」, 触媒化学融合研究センター第 63 回講演会, 産業技術総合研究所, つくば, 2018 年 12 月.

B-5) 特許出願

特願 2018-087046 (2018/04/27), 「ピリジン誘導体担持高分子及びこれを用いた転移反応」, 榎山儀恵, 山西克典, 渡辺 拓 (自然科学研究機構), 2018 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).

分子研オープンキャンパス主催 (2018).

学会誌編集委員

日本化学会化学と工業編集委員 (2017, 2018).

その他

進路講演会愛知県立岡崎北高等学校 (2018).

出前授業愛知県立岡崎北高等学校 (2016, 2017, 2018).

職場体験学習受入岡崎市立南中学校 (2018).

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-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, 「錯体触媒化学」, 2018 年 1 月.

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域研究 (研究領域提案型), 「ハロゲン結合を基盤とする有機分子触媒の高分子固定化とキラル反応場の創成」, 榎山儀恵 (2018 年–2019 年).

公益財団法人旭硝子財団 2018 年度採択研究助成プログラム「第1分野」, 「ハロゲン結合を活用する有機分子触媒高分子反応場の創成」, 榎山儀恵 (2018 年–2019 年).

公益財団法人永井科学技術財団平成 29 年度研究奨励金, 「鋳型重合による有機分子触媒反応場の創成」, 榎山儀恵 (2018 年–2019 年).

アステラス病態代謝研究会平成 29 年度研究助成金,「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).

鈴木謙三記念医科学応用研究財団平成 29 年度調査研究助成,「ヨードニウム錯体触媒による抗悪性腫瘍薬スピロ環状ラク톤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).

住友電工グループ社会貢献基金 2016 年度学術・研究助成,「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).

住友財団 2016 年度基礎科学研究助成,「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).

大幸財団平成 28 年度(第 26 回)自然科学系学術研究助成,「異種酸性官能基複合型キラル分子性触媒の創製と精密合成反応の開発」, 榎山儀恵 (2016 年–2017 年).

2015 年度内藤記念科学奨励金・研究助成,「ペルフルオロビナフチル誘導体の分子修飾に基づくキラルハロゲン結合供与体触媒の設計・開発」, 榎山儀恵 (2016 年–2017 年).

ノバルティス科学振興財団第 28 回研究奨励金,「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ールの創製と触媒機能創出」, 榎山儀恵 (2015 年–2016 年).

2015 年度ヨウ素研究助成金,「キラルヨウ素結合供与体触媒の設計・開発を基盤とする不斉合成」, 榎山儀恵 (2015 年–2016 年).

科研費基盤研究(C),「有機分子アリル化剤の開発を基軸とする革新的不斉有機分子触媒反応の開拓」, 榎山儀恵 (2011 年–2013 年).

科研費若手研究(B),「ペルフルオロフェニル基の特性を利用した不斉有機酸触媒の開発とアリル化反応への応用」, 榎山儀恵 (2009 年–2010 年).

科研費特定領域研究「協奏機能触媒」,「 π -アリル・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、本来的にキラルでありエナンチオマー的に純粋である。このことは、物質のキラリティーが至るところで私たちの日常に浸透している所以である。私たちの社会に欠かすことのできない物質・材料にキラリティーを組み入れること、それを可能にする一連の方法論を開発することは、次世代の純粋化学と応用化学の両面、そして材料科学において、極めて大きな意味をもつ。

当グループでは、キラル分子を供給する方法論の開拓とその確立を目指し、不斉分子触媒の設計・合成と触媒の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。2018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、数報の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ル化学からキラル分子の振る舞いを明らかにするキラル分子科学への応用展開を目指したい。

錯体物性研究部門

正 岡 重 行（准教授）（2011 年 2 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：錯体化学

A-2) 研究課題：

- a) ルテニウム単核錯体を利用した電気化学・光化学的 CO₂ 還元触媒の開発
- b) 分子性触媒モジュールの自己集合によるフレームワーク触媒の開発
- c) 近赤外光を駆動力とする光誘起電子移動反応系の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ルテニウムイオンを有する金属錯体を対象とし、二酸化炭素（CO₂）還元触媒の開発に取り組んだ。具体的には、ルテニウムポリピリジル単核錯体に対しホスフィン配位子を導入した錯体（**RuP**）を用いた触媒開発を行った。導入したリン原子の *trans* 影響により、金属－基質間の電子的相互作用に大きな変化が得られた。この *trans* 影響により、**RuP** はホスフィン配位子を持たない錯体と比較して小さな過電圧で電気化学的 CO₂ 還元反応を触媒することが可能であった。また、**RuP** は可視域に metal-to-ligand charge transfer (MLCT) に由来する強い吸収帯を有していた。そこで可視光を駆動力とする光化学的 CO₂ 還元反応についても検討を行ったところ、**RuP** が光増感剤・触媒能を併せ持つ機能統合型触媒として機能することが明らかとなった。またその触媒回転頻度・触媒回転数・生成物選択性は既存の機能統合型 CO₂ 還元触媒と比較して十分に高いものであった。
- b) 触媒活性点と分子間相互作用サイトを有する分子性触媒モジュールを非共有結合性相互作用により自己集積させることでフレームワーク触媒の構築を行った。水素発生触媒能と高い対称性とを併せ持つバドルホイール型二核錯体に対し、分子間相互作用サイトとしてナフタルイミド部位を導入した分子性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材料の構築に成功した。更に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。また、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) 近赤外域に強い吸収帯を有する歪んだフタロシアニン誘導体を用い、近赤外光を駆動力とする電子移動反応の開発に取り組んだ。まず、フタロシアニン骨格中に電子吸引性のクロロ基を導入することで HOMO のエネルギー準位が低下し、光安定性の高い色素となることが明らかとなった。このクロロ基導入型フタロシアニンに対し犠牲還元剤の存在下、近赤外光を照射したところ、光誘起電子移動（Photoinduced electron transfer, PET）反応が進行し一電子還元体であるラジカルアニオンが生成することが判明した。また、得られたラジカルアニオンは高い安定性を有していた。本研究で得られた反応系は、近赤外光を駆動力とする dynamic quenching 機構による PET 反応の初めての例である。

B-1) 学術論文

S. K. LEE, M. KONDO, M. OKAMURA, T. ENOMOTO, G. NAKAMURA and S. MASAOKA, "Function-Integrated Ru Catalyst for Photochemical CO₂ Reduction," *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 16899–16903 (2018).

R.-Z. LIAO, S. MASAOKA and P. E. M. SIEGBAHN, “Metal Oxidation States for the O–O Bond Formation in the Water Oxidation Catalyzed by a Pentanuclear Iron Complex,” *ACS Catal.* **8**, 11671–11678 (2018).

T. NAKAMURA, M. ASADA, M. YOSHIDA, M. KONDO and S. MASAOKA, “Possibility of Dielectric Material: Magnetic Resonance Study of Oxo-Bridged Dinuclear Ruthenium Mixed-Valence Complex,” *ChemistrySelect* **3**, 10526–10531 (2018).

S. K. LEE, M. KONDO, G. NAKAMURA, M. OKAMURA and S. MASAOKA, “Low-Overpotential CO₂ Reduction by Phosphine-Substituted Ru(II) Polypyridyl Complex,” *Chem. Commun.* **54**, 6915–6918 (2018).

T. ENOMOTO, M. KONDO, M. ASADA, T. NAKAMURA and S. MASAOKA, “Near-IR Light-Induced Electron Transfer via Dynamic Quenching,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 11282–11287 (2018).

T. WAKAKI, K. SAKAI, T. ENOMOTO, M. KONDO, S. MASAOKA, K. OISAKI and M. KANAI, “C(sp³)-H Cyanation Promoted by Visible-Light Photoredox/Phosphate Hybrid Catalysis,” *Chem. –Eur. J.* **24**, 8051–8055 (2018).

P. CHINAPANG, M. OKAMURA, T. ITOH, M. KONDO and S. MASAOKA, “Development of a Framework Catalyst for Photocatalytic Hydrogen Evolution,” *Chem. Commun.* **54**, 1174–1177 (2018). (Selected as a Back Cover Picture)

B-3) 総説, 著書

A. FUKATSU, M. KONDO and S. MASAOKA, “Electrochemical Measurements of Molecular Compounds in Homogeneous Solution under Photoirradiation,” *Coord. Chem. Rev.* **374**, 416–429 (2018). (Special Issue of 43rd International Conference on Coordination Chemistry)

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

S. MASAOKA, “Development of Molecular Modules for Artificial Photosynthesis,” 10th Asia Photochemistry Conference (APC 2018), Taipei (Taiwan), December 2018.

S. MASAOKA, “Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation,” 9th Asian Biological Inorganic Chemistry Conference, UTown, Stephen Riady Centre, Singapore, December 2018.

S. MASAOKA, “Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation,” The International Symposium on Bioinorganic Chemistry 2018, Okazaki Conference Center, Okazaki, November 2018.

S. MASAOKA, “Development of Molecular Modules for Artificial Photosynthesis,” 2018 Nankai International Conference on Advanced Materials, Nankai University, Tianjin (China), November 2018.* (Keynote)

正岡重行, 「人工光合成への挑戦～同志社大学で育んだ化学と絆～」, 同志社大学理工学部機能分子・生命化学科 10 周年記念講演会, 同志社大学今出川キャンパス寒梅館, 京都, 2018 年 10 月.

正岡重行, 「金属錯体の電子移動制御に立脚した小分子変換」, 金井研究室コロキウム, 東京大学薬学部, 東京, 2018 年 9 月.

正岡重行, 「金属錯体の内側に閉じ込められた水素イオン」, 第 4 回機能化学研究会, かんぽの宿有馬, 神戸, 2018 年 8 月.

S. MASAOKA, “Pentanuclear Iron Catalysts for Water Oxidation,” The 43rd International Conference on Coordination Chemistry (ICCC2018), Sendai (Japan), August 2018.* (Keynote)

正岡重行, 「合成がつなぐ人類の未来～次世代エネルギー開発と地球外生命探査～」, 湘南国際村アカデミア連続講演会「カフェ・インテグラル」, 神奈川韓国会館 7 階, 横浜, 2018 年 6 月.

S. MASAOKA, “Water Oxidation: High Five Iron,” 大阪大学 CSC 特別講義, 大阪大学吹田キャンパス, 吹田, 2018 年 6 月.

正岡重行,「5つの金属イオンが織り成す触媒機能」,平成30年度触媒学会ファインケミカルズ合成触媒セミナー,首都大学東京秋葉原サテライトキャンパス,東京,2018年5月.

S. MASAOKA, “Pentamuclear Iron Catalysts for Water Oxidation,” The 3rd Japan-UK Joint Symposium on Coordination Chemistry, University of St Andrews, St Andrews (U.K.), April 2018.

正岡重行,「金属錯体による電気／光化学的小分子変換反応」,日本化学会第98春季年会ATP「人工光合成分野における触媒化学的アプローチ」,日本大学理工学部船橋キャンパス,船橋,2018年3月.

正岡重行,「5つの金属イオンが織り成す革新機能」,高分子学会九州支部フォーラム,崇城大学,熊本,2018年2月.

正岡重行,「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」,新学術領域「ハイブリッド触媒」第1回公開シンポジウム,名古屋大学ES総合館ESホール,名古屋,2018年1月.

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」,ABC若手ワークショップ,国立天文台,三鷹,2018年1月.

B-5) 特許出願

特願2018-157577,「有機化合物の酸化物の製造方法」,相田冬樹,正岡重行,岡村将也(JXTGエネルギー(株),自然科学研究機構),2018年.

B-6) 受賞,表彰

Sze Koon LEE, 第1回SOKENDAI賞(2018).

Pondchanok CHINAPANG, 物理科学研究科学科長賞(2018).

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2018」優秀ポスター賞(2018).

近藤美欧, 第7回自然科学研究機構若手研究者賞(2018).

Pondchanok CHINAPANG, 日本化学会第98春季年会(2018)学生講演賞(2018).

近藤美欧, 日本化学会第6回女性化学者奨励賞(2018).

Sze Koon 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).

Sze Koon 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特別講演証 (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

日本化学会東海支部役員候補者選考委員会委員 (2018-).

日本化学会東海支部代議員 (2017-).

錯体化学会副事務局長 (2015-).

錯体化学会理事 (2015-2017).

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「刺激と応答——金属錯体は何を結ぶか」所内対応 (2018).

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 CSJ 化学フェスタ実行委員 (2013-2016).

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 (2013–2017).

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」, 2018年度後期.

大阪大学大学院応用化学専攻, 集中講義「CSC 特別講義」, 2018年6月.

B-9) 学位授与

Sze Koon LEE, 「Development of Metal-Complex Based Catalysts for Electro- and Photo- Chemical CO₂ Reduction」, 2018年9月, 博士(理学).

Pondchanok CHINAPANG, 「Design and Construction of Framework Catalysts for Hydrogen Evolution」, 2018年3月, 博士(理学).

深津重里紗, 「Studies on Electrochemical Responses of Molecular Compounds in Homogeneous Solution under Photoirradiation」, 2018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がけ研究「光エネルギーと物質変換」領域,「水の可視光完全分解を可能にする高活性酸素発生触媒の創製」, 正岡重行 (2009年–2012年).

科研費若手研究(B),「水の分解反応に対する非貴金属系高活性金属錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2009年–2010年).

科学技術振興機構重点地域研究開発推進プログラム「シーズ発掘試験A(発掘型)」,「有機–無機複合型超高活性酸素発生錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2009年).

九州大学教育研究プログラム・研究拠点形成プロジェクト,「混合原子価2核錯体を用いた量子セルオートマトン材料の開発」, 正岡重行 (2009年).

(財)鉄鋼業環境保全技術開発基金第29回環境助成研究,「鉄–硫黄系金属錯体を用いた安価高活性水素発生触媒の創成」, 正岡重行 (2008年–2009年).

B-11) 産学連携

JXTG エネルギー (株),「五核鉄錯体を利用した酸素酸化反応」, 正岡重行 (2018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、主に金属錯体を対象とした基礎研究を進めている。2018年は、a) ルテニウム単核錯体を利用した電気化学・光化学的CO₂還元触媒の開発、b) 分子性触媒モジュールの自己集合によるフレームワーク触媒の開発、c) 近赤外光を駆動力とする光誘起電子移動反応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、CO₂還元反応のみならず、安定小分子の効率的変換を可能と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、近赤外光を駆動力とする新たな反応の開発に向けて研究を展開し、近赤外光を利用した物質変換系の構築を目指す予定である。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の確立へと繋げていく所存である。

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) KaiC はシアノバクテリア概日時計システムの中核をなす時計タンパク質である。これまでの研究 (*Science* 2015, *BIOPHYSICS* 2015, *Biophys. Physicobiol.* 2016) を通して、

- ① KaiC の ATP 加水分解活性 (ATPase) がシステムの発振周期 (約 24 時間) を規定する重要な因子であること、
- ② KaiC の ATPase が 3 種類の抑制的制御を受けて著しく低活性化 (12 ATP d^{-1}) されていること、
- ③ ATPase の遅い時間スケールをシステム全体に波及させることで 24 時間周期を実現していること、

等を明らかにしてきた。しかしながら、KaiC 内部で生み出された遅い時間スケールの運動が、分子間相互作用の階層を介してどのようにシステム全体へと伝搬されるのかは不明であった。そこで 2018 年度は、KaiC が KaiB と相互作用して KaiBC 複合体を形成する過程の速度論的な解析を行った。

蛍光標識した KaiC を用いて KaiBC 複合体の蓄積を実時間解析したところ、Conformational Selection と呼ばれる分子認識機構 (CS 機構) に従うことが明らかとなった。これは KaiC の構造変化が KaiB 結合に先行する反応モデルであり、KaiB の立場に立てば、相互作用に適した状態の KaiC だけを探し出して選択的に結合していることになる。詳細は省略するが、KaiB が加水分解産物である ADP を結合したリン酸化型 KaiC を選択して結合することにより、KaiBC 複合体の形成が KaiC の遅い ATPase によりゲーティング (律速) される。KaiC には反応を積極的に遅くするための制御だけでなく、その時刻情報を損なうことなく他の分子種に伝搬し、最終的にシステム全体へ波及させていく仕組みが備わっている (*Sci. Rep.* 2018, *Biol. Clock* 2018, *時間生物学* 2018)。

- b) 生体分子システム (時計タンパク質、抗酸化酵素、受容体など) の X 線溶液散乱を記録し、散乱データと結晶構造の比較や低分解能モデルの構築を通して、分子システムの動的構造解析を行った。

B-1) 学術論文

A. MUKAIYAMA, Y. FURUIKE, J. ABE, E. YAMASHITA, T. KONDO and S. AKIYAMA, “Conformational Rearrangements of the C1 Ring in KaiC Measure the Timing of Assembly with KaiB,” *Sci. Rep.* **8**, 8803 (10 pages) (2018). doi:10.1038/s41598-018-27131-8

Y. FURUKAWA, C. LIM, T. TOSHA, K. YOSHIDA, T. HAGAI, S. AKIYAMA, S. WATANABE, K. NAKAGOME and Y. SHIRO, “Identification of a Novel Zinc-Binding Protein, C1orf123, as an Interactor with a Heavy Metal-Associated Domain,” *PLoS One* **13**, e0204355 (2018). doi: 10.1371/journal.pone.0204355

B-3) 総説, 著書

秋山修志, 古池美彦, 向山厚, 「変化し続ける概日時計研究のかたち」, *時間生物学* **24**, 92–99 (2018).

秋山修志, 「芸は身を助く?」, *生物物理* **58**, 181 (2018).

B-4) 招待講演

S. AKIYAMA, “*trans*-Hierarchical Nature of Cyanobacterial Circadian Clock System,” SSBR 2018, Sapporo (Japan), July 2018.

S. AKIYAMA, “*trans*-Hierarchical Nature of Cyanobacterial Circadian Clock System,” Frontier Bioorganization Forum 2018, Okazaki (Japan), July 2018.

S. AKIYAMA, “Slow and Temperature-Compensated ATP Hydrolysis Reaction Catalyzed by Circadian Clock Protein KaiC,” The 3rd Solar Fuel Material Workshop, Osaka (Japan), March 2018.

S. AKIYAMA, “Slowness and temperature compensation both transferred from intra- to inter-molecular scales in cyanobacterial circadian clock,” The 91st Annual Meeting of the Japanese Biochemical Society, Kyoto (Japan), September 2018.

秋山修志, 「なぜ? どうして? いまだ説明できない生物時計の残された謎」, 第58回生物物理若手の会夏の学校, ホテルパーク, 岐阜, August 2018.

秋山修志, 「藍藻における概日周期と温度補償性の分子科学」, 蛋白研セミナー／SPRING-8先端利用技術ワークショップ, 大阪大学, August 2018.

秋山修志, 「分子科学研究所・協奏分子システム研究センターにおける概日時計研究と支援体制の構築」, CyanoClock 1.0, 名古屋大学, 名古屋, June 2018.

秋山修志, 「地球の自転周期がエンコードされたタンパク質, KaiC」, 講演会, 京都大学, 京都, February 2018.

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).

日本生物物理学会代議員 (2017–2018).

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

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

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

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

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

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

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

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

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

概日時計システムの第1の性質にあたる遅さの起源については研究の見通しが立った。第2の性質に相当する温度補償性は概日時計に共通して観察される特徴であり、概日リズムが一般的な化学振動子と区別して扱われる理由の一つでもある。化学の世界では、「遅さ」と「温度補償性」は通常相容れない現象であるが、KaiCのATP加水分解反応は極端に遅く (12 d^{-1}) かつ温度補償制御されている ($Q_{10} = 1.0$)。基盤研究(S)の計画に沿って温度依存変異体の網羅的スクリーニングや構造ベースでの設計を行い、原子スケールの情報をもとに第1と第2の性質を互いに矛盾なく説明できるモデルを構築したい。

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完全にゼロからデザインすること，更には自然界のタンパク質分子を改造することで，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う。

- a) $\alpha\beta$ 型タンパク質構造のデザイン；これまでに2次構造パターンと3次構造モチーフの整合性に関するルールを発見し，これらのルールを用いることで100残基以下の様々な形状の $\alpha\beta$ 型タンパク質構造のデザインに成功してきた。これらのルールがより大きなサイズのタンパク質デザインにも適用可能かどうか検証するため，100残基以上のサイズのタンパク質構造のデザインに取り組んだ。その結果，これらルールに加えて，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全体構造との整合性，すなわち，2次構造パターン－3次構造モチーフ－全体構造の間の整合性が重要であることを明らかにした。これらを考慮して5本ストランドの $\alpha\beta$ 型タンパク質を新たにデザインし，大腸菌に組み込み発現・精製し，生化学実験により折り畳み能を調べたところ，デザインは安定な構造を形成し，NMRにより決定された構造は，計算機モデルとよく一致していた。現在は，6本ストランドの $\alpha\beta$ 型タンパク質をデザインすることで，発見したデザイン原理の有効性を検証中である。
- 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，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。まず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，計算機上で多様な形状の α ヘリカル構造の構築に成功した。計算機でデザインした3つの異なる形状の α ヘリカルタンパク質について，折り畳み能を生化学実験により調べたところ，これら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構造解析を行ったところ，計算機モデルはNMR構造とよく一致していた。今後は，多様な α ヘリカル構造を用いることで，機能性タンパク質のデザインを行う。
- c) 折り畳みに必須なアミノ酸の種類の探索；自然界のタンパク質は20種類のアミノ酸からなる。タンパク質が自発的に特定の構造に折り畳むためには，これら20種類のアミノ酸全てが必要なかどうか明らかにすることを目的として，タンパク質の疎水性コアパッキングに重要とされる ILE および LEU を全く含まない，疎水性コア残基が VAL のみからなる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，NMRにより立体構造を解析したところ，デザインは変性温度が100℃以上の安定な立体構造を形成していた。本研究成果は，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ないことを示すものである。
- 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、b) でデザインした α ヘリカル構造を用いるなど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計算機デザインで改造し、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。その結果、デザインはヘムに結合していることが明らかになった。現在は、結合の親和性を向上させるべく再設計を行っている。
- 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、回転モータータンパク質である F-ATPase および V-ATPase を改造することで、そのメカニズムに迫った。分子動力学シミュレーション、1 分子観測、結晶構造解析等あらゆる手法を駆使して、構造変化のメカニズムに迫ったところ、F-ATPase の構造変化に重要な部位を特定し、V-ATPase の動的機能発現における非触媒部位のアロステリックな役割を明らかにした。
- g) 自然界に存在しないトポロジーのデザイン；簡単な理論計算では考えることができるが、自然界には現存しないトポロジーが多数あることが示唆されている。本研究では、自然界に現存しない新規トポロジーを持つタンパク質分子を創ることで、新規トポロジーは物理化学的に立体構造形成することが困難なために存在していないのか、それとも偶然生物が見つけ出していないだけなのか、これらの謎に迫る。これまでに、網羅的なタンパク質立体構造データベース検索を行い、いくつかの新規トポロジーの同定に成功した。現在は、これら新規トポロジーの計算機デザイン及び生化学実験による折りたたみ能の検証を行っている。
- h) タンパク質構造の合理安定化法の開発；タンパク質の耐熱性を向上させることは、タンパク質を産業利用する上で重要である。タンパク質をゼロからデザインする技術を応用して、自然界のタンパク質を合理的に安定化する手法の開発を行った。開発した手法を用いて、バイオマス糖化に重要な β グルコシダーゼおよび創薬ターゲットの一つである GPCR の耐熱化を行っている。

B-4) 招待講演

古賀信康,「De novo protein design & Application to design thermostable proteins, International Symposium on “Artificial Cell Reactor Science & Technology”」, 東京大学伊藤謝恩ホール, 東京, 2018 年 4 月.

古賀信康,「生命現象を生み出す分子「タンパク質」をゼロから創る」, 生命創成探究センター開所記念講演会, 岡崎, 2018 年 5 月.

古賀信康,「整合性原理のまわりをぐるぐると, 理論生物物理研究会～理論生物物理の今後を考える～」, 京都大学大学院理学研究科, 京都, 2018 年 6 月.

古賀信康,「設計図通りに折りたたまないデザインタンパク質」, 第 18 回蛋白質科学会年会ワークショップ「拡大する蛋白質の世界: Anfinsen のドグマを超えて」, 新潟朱鷺メッセ, 新潟, 2018 年 6 月.

古賀信康,「Toward generation of de novo designed protein structure library」, 生命創成探究センター Frontier Bio-Organization Forum, 岡崎, 2018年7月.

古賀信康,「Explore vast sequence space by de novo design」, ImPACT 野地プログラムセミナー, 東京大学工学部, 東京, 2018年9月.

古賀信康,「タンパク質の合理設計:ゼロからの創成と天然物の改造」, 生命創成探究センター第1回シンポジウム, 岡崎, 2018年10月.

古賀信康,「合理デザインで拓く新規タンパク質配列空間」, 169委員会第57研究会, 東京大学大学院農学生命科学研究科フードサイエンス棟中島薫一郎記念ホール, 東京, 2018年10月.

古賀信康,「DBTL in protein design, Trends in Computational Molecular Biology」, 石川四高記念文化交流館, 金沢, 2018年11月.

古賀信康,「超安定な理想タンパク質の合理設計と天然タンパク質の累積的耐熱化」, Biothermology Workshop, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2018年12月.

T. KOSUGI, “Rational Design of ATP Binding Site to Understand Rotary Molecular Motor,” Okazaki Conference, Okazaki (Japan), 2018年9月.

T. KOSUGI, “Rational Design of ATP Binding Site; An Attempt to Understand Molecular Motor,” 第56回日本生物物理学会「創って知る生物物理:生命現象の再構成と理解」, 岡山, 2018年9月.

小杉貴洋,「V₁-ATPaseの非触媒界面にATP結合部位を作ることによってその役割を明らかにする」, 第8回分子モーター討論会, 東京, 2018年11月.

B-5) 特許出願

特願 2018-172810 (2018/10/18),「耐熱性 β グルコシダーゼ」, 古賀信康(自然科学研究機構), 2018年.

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).

古賀信康, 分子科学研究奨励森野基金 (2018).

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・ドッキングデザイン (2015-2018).

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).

第 111 回分子科学フォーラム特別編「分子をデザインする」講師 (2017.2.3).

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-8) 大学での講義, 客員

京都大学理学部,「化学特別講義2」, 2018年12月10日-12日.

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-2019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 (2018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_1 -ATPase の動作原理」, 古賀信康 (2015年-2019年).

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

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

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,「世界最小蛍光タンパク質の創生——計算機科学と生体イメージングを繋ぐ——」, 小杉貴洋 (2018年-2019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。いくつかのテーマについては, 成果をまとめる時期に来ている。課題は前年度と同様, ①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こと, ②デザインしたタンパク質の折りたたみ能および機能発現能を, 大量かつ高速に検証する生化学実験手法を構築すること, である。

機能分子システム創成研究部門

山 本 浩 史（教授）（2012 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：分子物性科学

A-2) 研究課題：

- a) 有機モットFET（FET＝電界効果トランジスタ）
- b) 有機超伝導FET
- c) カイラル伝導体によるスピン偏極デバイス

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。本年はモットFETの室温動作を目的として液晶性ドナー分子による単分子膜デバイスを作製し、さらにそのドーピング条件探索を行った。その結果、膜質の改良や安定化を実現し、今後の性能向上に向けた知見を得た。
- 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これまでの研究で明らかとなっている。基板からの歪みや冷却速度を制御することによって電荷ギャップを小さくしたFETあるいは電気二重層トランジスタを作製し、これにゲート電圧を印加することによって、電界誘起超伝導相とその周辺相に関する計測を行った。その結果、バンド幅とバンドフィリングをパラメーターとした時の基底状態相図において、バンドフィリングがちょうど 0.5 の時だけに現れる超伝導相など、これまで予想されていたものとは異なる点が多数見出された。また超伝導相近傍の異常金属相についても様々な知見を得ることができた。
- c) 有機モット絶縁体の中には、分子構造あるいは結晶構造に起因するカイラルな伝導体が存在する。また分子モーターは芳香族系の伝導性分子であるが、モーターの回転に伴って分子のカイラリティが交互に反転することが知られている。これらの伝導性とカイラリティが共存する系においては、伝導電子の運動方向に依存したスピン選択性（Chirality-Induced Spin Selectivity）が表れることが期待されるため、磁性電極を用いたスピン流検出に取り組んだ。その結果、分子モーターにおいてヘリシティが M から P に反転すると、流れる電流のスピン偏極が反転することが明らかとなった。この分子モーターは光照射によって駆動されているため、この成果は光によるスピン偏極の反転に成功したことを意味している。

B-1) 学術論文

H. OIKE, M. SUDA, M. KAMITANI, A. UEDA, H. MORI, Y. TOKURA, H. M. YAMAMOTO and F. KAGAWA,
“Size Effects on Supercooling Phenomena in Strongly Correlated Electron Systems: IrTe₂ and θ -(BEDT-TTF)₂RbZn(SCN)₄,”
Phys. Rev. B **97**, 085102 (7 pages) (2018).

Y. KAWAKAMI, T. AMANO, Y. YONEYAMA, Y. AKAMINE, H. ITOH, G. KAWAGUCHI, H. M. YAMAMOTO, H. KISHIDA, K. ITOH, T. SASAKI, S. ISHIHARA, Y. TANAKA, K. YONEMITSU and S. IWAI, “Non-Linear Charge Oscillation Driven by Single-Cycle Light-Field in an Organic Superconductor,” *Nat. Photonics* **12**, 474–478 (2018).

B-3) 総説, 著書

H. M. YAMAMOTO, M. SUDA and Y. KAWASUGI, “Organic Phase-Transition Transistor with Strongly Correlated Electrons,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **57**, 03EA02 (7 pages) (2018).

M. SUDA and H. M. YAMAMOTO, “Field-, Strain- and Light-Induced Superconductivity in Organic Strongly Correlated Electron Systems,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20**, 1321–1331 (2018).

M. SUDA, “A New Photo-Control Method for Organic–Inorganic Interface Dipoles and Its Application to Photo-Controllable Molecular Devices,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **91**, 19–28 (2018). (Award Accounts)

M. SUDA, “Development of Novel Phase Transition Devices Utilizing Strongly Correlated Molecular Conductors,” *Molecular Science*, **11**(1), A0092 (8 pages) (2017). (Award Accounts)

山本浩史, 須田理行, 「光で制御する超伝導～光応答性電気二重層トランジスタ～」, *物理学会誌* **73**(3), 143–147 (2018).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistor with Strongly Correlated Electrons,” NanoThailand2018, Bangkok (Thailand), December 2018.

H. M. YAMAMOTO, “Organic Field-Effect-Transistors based on Charge-Transfer Salts,” Organic Semiconductors, Conductors, and Electronics, Nagakute, Aichi (Japan), October 2018.

H. M. YAMAMOTO, “Electronic Phase Transition at an Organic Field-Effect-Transistor Interface,” 2018 Int’l Roundtable of NanoScience and NanoTechnology Symposium, Shanghai (China), September 2018.*

H. M. YAMAMOTO, “Molecular conductors for electronics,” ICC2018, Sendai (Japan), August 2018.

H. M. YAMAMOTO, “Field-effect-transistors with phase-transitions,” PACCON2018, Hat Yai (Thailand), February 2018.

M. SUDA, “Field-, strain- and light-induced superconductivity in quasi-two-dimensional molecular conductors,” Keio International Symposium on 2D Materials 2018, Yokohama (Japan), February 2018.

M. SUDA, “Superconducting FETs based on organic strongly correlated materials,” Gordon Research Conference—Conductivity and Magnetism in Molecular Materials—, Smithfield, RI (U.S.A.), August 2018.

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).
須田理行, 文部科学大臣表彰 若手科学者賞 (2018).

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 (2018-).
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 (2014-2017).
分子科学会企画委員 (2012-2016), 運営委員 (2018-).

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).
第13回分子科学討論会組織委員 (渉外) (2018-).
MRM2019組織委員 (2018-).

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

総合研究大学院大学物理科学研究科構造分子科学専攻副専攻長 (2017).
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, 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」, 2018年7月.
東北大学大学院理学系研究科, 委嘱教授, 2015年4月- .

B-9) 学位授与

Tianchai Choopawa, 「Development of n-type organic semiconductors toward Mott-type Field-effect-transistor investigation」, 2018年9月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

研究活動スタート支援,「カイラル化合物による電流-スピン流相互変換」, 廣部大地 (2018年-2020年).

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がけ研究,「電子相関を利用した新原理有機デバイスの開発」, 山本浩史 (2009年-2013年).

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

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

C) 研究活動の課題と展望

有機モットFETの室温における動作効率を向上させるためには、構造が規則的かつ安定な単分子膜を作製し、これにドーピングを行う必要がある。これまでの検討で用いている液晶性分子は、高温でのアニーリングに対して不安定であるため、共有結合などを用いて膜構造を固定していく必要があると考えられる。そのため単分子膜の分子配列を周期的に保ったまま固定する手法について、現在検討中である。一方、基底状態の相図に関する研究では、超伝導相に近づくほどバルク伝導と界面伝導の切り分けが困難になってくることが課題となっている。バルク結晶が超伝導相に入らないよう、バルク部分のフィリング制御をすることも含めた系の設計をすることによって、今後はさらに詳細な基底状態相図が得られると考えられる。またカイラリティによるスピン流生成は、これまで薄膜でしか観測されていない現象であるため、これがバルクになった場合にも観測可能な現象なのかどうか、といった点を検証する必要がある。同時に、なぜ軽元素のみの化合物で巨大なスピン軌道相互作用が生じるのか、その詳細なメカニズムの解明にも、理論・計算化学との共同研究によって取り組みたい。

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
- b) DFT 計算による反応メカニズムの解明

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。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。また、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。最近では、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。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、榎山グループとの共同研究で、ナフタレンモノマーの選択的フッ素化に成功した。現在、これらを原料にペリレンや DIP の完全フッ素化に取り組んでいる。
- b) 最近、榎山グループはアルジミンの特異な [1,3]- 転位反応を発見し、これが極めて高い不斉転写で進行することを見出した。この前例のない転位反応メカニズムを解明するために、SMD/M06-2X-D3/6-311+G(d,p) レベルでの DFT 計算を行った。本来、[1,3]- 転位反応は禁制であるので、二つの多段階ルートを提案した。求電子置換反応のルートは、最もシンプルな転位メカニズムであるが、立体選択性ははばならないことがわかった。一方、協奏的な [3,3] シグマトロピー転位を経るルートでは、不斉転写や反応性をよく説明できることが分かった (論文投稿中)。

B-8) 大学での講義、客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「構造物性科学」, 2018 年 12 月 4 日-7 日.

C) 研究活動の課題と展望

榎山准教授とのフッ素化リレン化合物の共同研究が順調に進んでいる。榎山グループのメンバーが積極的に取り組んでくれたおかげで、大変困難なナフタレンの選択的フッ素化に関する多くの知見が得られた。来年度の機器センターへの異動後は、これらの有機 n 型半導体を分子・物質合成プラットフォームを通じて、大学や企業の研究者に提供していきたい。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、DFT 計算によって解明することができ、論文投稿まで漕ぎ着けた。今後も、これまでの有機化学の知識と経験を生かして、所内外の分子科学研究者をサポートしていきたい。

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超高速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ング、プラズモン波束の運動の可視化等が可能であることを示した。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。また近接場光学活性イメージング法を開発し、金属ナノ構造の局所光学活性、キラルな光場の空間構造の研究に適用した。
- 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、開発した近接場光学活性イメージング装置を用い、局所的な光学活性を測定した。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、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、局所的な誘起双極子が局所的な円偏光場の起源になること等、幾つかの基礎的に重要な結果が得られている。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。通常の遠方場の顕微鏡においても光学活性によるイメージングは未開拓であるが、我々は高い精度・確度で顕微光学活性イメージングを可能とする装置を開発し、微結晶試料、液晶、生体組織等へのその応用を、共同研究を通じて開始している。
- 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. HOSHINA, N. YOKOSHI, H. OKAMOTO and H. ISHIHARA, “Super-Resolution Trapping: A Nanoparticle Manipulation Using Nonlinear Optical Response,” *ACS Photonics* **5**, 318–323 (2018).

S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, “Imaging Chirality of Optical Fields near Achiral Metal Nanostructures Excited with Linearly Polarized Light,” *ACS Photonics* **5**, 1486–1492 (2018).

K. MASUDA, R. SHINOZAKI, Y. KINEZUKA, J. LEE, S. OHNO, S. HASHIYADA, H. OKAMOTO, D. SAKAI, K. HARADA, K. MIYAMOTO and T. OMATSU, “Nanoscale Chiral Surface Relief of Azo-Polymers with Nearfield OAM Light,” *Opt. Express* **26**, 22197–22207 (2018).

K. Q. LE, S. HASHIYADA, M. KONDO and H. OKAMOTO, “Circularly Polarized Photoluminescence from Achiral Dye Molecules Induced by Plasmonic Two-Dimensional Chiral Nanostructures,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 24924–24932 (2018).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

K. Q. LE and H. OKAMOTO, “Circular Polarization Dissymmetry of Two Photon-Induced Photoluminescence from Chiral Plasmonic Nanostructured Metasurfaces,” *Proc. SPIE* **10712**, 1071214 (3 pages) (2018).

S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, “Active Polarization Control of Optical Fields Localized on Gold Nano-Rectangles,” *Proc. SPIE* **10712**, 107121S (2 pages) (2018).

B-3) 総説, 著書

岡本裕巳, 「ナノ空間領域の構造と近接場光のキラリティ」, *レーザー研究* **46**, 187–191 (2018).

岡本裕巳, 「NEWS — ノーベル物理学賞：アーサー・アシュキン博士の業績」, *パリティ* **33(12)**, 40–42 (2018).

B-4) 招待講演

H. OKAMOTO, “Imaging and control of chiral plasmons,” The Second Symposium of Chiral Molecular Science and Technology ‘Advanced Materials Science, Biology & Nanophotonics,’ Chiba (Japan), January 2018.

岡本裕巳, 「物質の共鳴・非線形・偏光応答を活用した操作手法の拡張と高度化」, レーザー学会学術講演会第38回年次大会シンポジウムS04「光圧による物質操作の新展開」, 京都, 2018年1月.

H. OKAMOTO, “Imaging and control of chiral plasmons,” International Symposium on Plasmonics and Nanophotonics (iSPN 2018), Hangzhou (China), May 2018.

H. OKAMOTO, “Nanoscale Imaging and Control of Chiral Plasmons,” The 7th Hsinchu Summer Course and Workshop, Emergent Functional Matter Science, Hsinchu (Taiwan), June 2018.

H. OKAMOTO, “Imaging and Control of Chiral Plasmons,” 11th International Conference on Nanophotonics (ICNP 2018), Wroclaw (Poland), July 2018.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, K. Q. LE and T. NARUSHIMA, “Detection and control of chiral optical near-field interaction,” The 12th International Conference on Excitonic and Photonic Processes in Condensed Matter and Nano Materials (EXCON 2018), Nara (Japan), July 2018.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA and T. NARUSHIMA, “Nanoscale imaging and control of chiral plasmons,” International Symposium on Chiral Magnetism (χ -mag2018), Nara (Japan), July 2018.

S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA, H. OKAMOTO, K. ENDO and Y. TOGAWA, “Spectral properties of chiral optical fields localized on chiral metal nanostructures,” International Symposium on Chiral Magnetism (χ -mag2018), Nara (Japan), July 2018.

S. HASHIYADA, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, “Mapping Polarization States of Plasmonic Fields,” 26th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS 2018), Jeju (Korea), August 2018.

H. OKAMOTO, Y. NISHIYAMA, K. IMAEDA and K. IMURA, “Plasmon Wave Dynamics Visualized by Femtosecond Near-Field Optical Microscopy,” TSRC Workshop on Molecular Videography, Telluride (U.S.A.), September 2018.

H. OKAMOTO, “Local optical activity of nanomaterials with nano-optics and chirality,” Department Colloquium, Department of Materials Science and Engineering, Seoul National University, Seoul (Korea), December 2018.

岡本裕巳,「ナノ物質の局所光学活性とキラリティ」, 第 29 回光物性研究会, 京都, 2018 年 12 月.

H. OKAMOTO, “Nanoscale imaging and control of chiral optical fields,” Smart NanoMaterials 2018: Advances, Innovation and Applications (SNAIA2018), Paris (France), December 2018.

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, ナノオブティクス賞 (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, ナノオブティクス賞 (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 (2017).

The 24th Congress of the International Commission for Optics (ICO-24), Program Committee Subcommittee (2017).

The 12th International Conference on Excitonic and Photonic Processes in Condensed Matter and Nano Materials (EXCON 2018), Program Advisory Board (2018).

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 (2012–2018).

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(2014–2018).

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

総合研究大学院大学物理科学研究科,「構造光科学」,2018年7月18日,19日,23日,25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).

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がけ研究,「強い局所光学活性を利用したキラル光デバイス」,成島哲也(2014年–2018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。これらの研究から得られたプラズモンのキラリティに関する性質を基礎として、キラルプラズモンが分子の特性に及ぼす効果に関する研究にも展開しつつあり、一部で成果が出始めた。通常の回折光学系による顕微鏡で精度の高い円二色性イメージングを可能とする装置開発も行い、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。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。2016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～2018年9月30日）*

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ソの展開

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。特に近年のマイクロ固体フォトリソ [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，新たなフォトリソ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。これまでに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ソで実証した。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 (THz) 波発生にも有利である。また、LA-PPMgLN を用いてピコ秒領域で mJ 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から、THz 波による電子加速までと幅広い展開が期待される。

B-1) 学術論文

- V. YAHIA and T. TAIRA**, “High Brightness Energetic Pulses Delivered by Compact Microchip-MOPA System,” *Opt. Express* **26**, 8609–8618 (2018).
- S. JOLY, M.-A. LEMESRE, B. LEVRIER, C. LYSZYK, B. PLANO, A. COURJAUD, T. TAIRA and L. BECHOUAE**, “A Quantitative Thermal and Thermomechanical Analysis for Design Optimization and Robustness Assessment of Microassembled High Power Yb:CaF₂ Thin-Disk Laser,” *Opt. Laser Tech.* **105**, 229–241 (2018).
- H. ISHIZUKI, V. YAHIA and T. TAIRA**, “Characteristics of Crystal Quartz for High-Intensity, Sub-Nanosecond Wavelength Conversion,” *Opt. Mater. Express* **8**, 1259–1264 (2018).
- N. H. MATLIS, F. AHR, A.-L. CALENDRON, H. CANKAYA, G. CIRMI, T. EICHNER, A. FALLAHI, M. FAKHARI, A. HARTIN, M. HEMMER, W. R. HUANG, H. ISHIZUKI, S. W. JOLLY, V. LEROUX, A. R. MAIER, J. MEIER, W. QIAO, K. RAVI, D. N. SCHIMPF, T. TAIRA, X. WU, L. ZAPATA, C. ZAPATA, D. ZHANG, C. ZHOU and F. X. KÄRTNER**, “Acceleration of Electrons in THz Driven Structures for AXSIS,” *Nuclear Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A* **909**, 27–32 (2018).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

- T. TAIRA**, “Distributed Face Cooling Modules for Tiny Integrated Lasers,” *LASE, SPIE Photonics West 2018*, 10513-38 (2018).
- S. W. JOLLY, F. AHR, N. MATLIS, V. LEROUX, T. EICHNER, K. RAVI, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, F. X. KAERTNER and A. MAIER**, “Towards Millijoule Narrowband Terahertz Generation Using Chirp-and-Delay in Periodically Poled Lithium Niobate,” *Mid-Infrared Coherent Sources (MICS), OSA High-brightness Sources and Light-driven Interactions Congress 2018*, ET1B.4 (2018).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Efficient Optical Parametric Generation Pumped by a Sub-Nanosecond MOPA Source,” *Mid-Infrared Coherent Sources (MICS), OSA High-brightness Sources and Light-driven Interactions Congress 2018*, MW1C.1 (2018).
- Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA**, “Design of Magnetic Anisotropy in Micro Domains for Yb:Fluoroapatite Laser Ceramics,” *The 7th Advanced Lasers and Photon Sources (ALPS'18), OPIC'18*, ALPS3-A-3 (2018).
- K. TAMURA, H. OHBA, M. SAEKI, T. TAGUCHI, H. H. LIM, T. TAIRA and I. WAKAIDA**, “Effects of High Irradiation Dose on a Nd:YAG/Cr:YAG Microchip Composite for Remote Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS),” *The 6th Laser Ignition Conference (LIC'18), OPIC'18*, LIC4-3 (2018).
- J. MORIMOTO, T. GOTO, J. PRITCHARD, M. MINA, T. TAIRA, Y. NAKAMURA, P. B. LIM, H. UCHIDA and M. INOUE**, “Magneto-optical Q-Switch Laser Using Neodymium Yttrium Aluminum Garnets,” *The 6th Laser Ignition Conference (LIC'18), OPIC'18*, LIC5-3 (2018).

- R. BHANDARI, N. ISHIGAKI, J. SAIKAWA, K. TOJO, Y. ITO, T. ONO and T. TAIRA**, “LIBS System for Trace Impurity Detection in Semiconductor Manufacturing Process,” *The 6th Laser Ignition Conference (LIC’18), OPIC’18*, LIC7-3 (2018).
- V. YAHIA and T. TAIRA**, “Development of High-Brightness High-Energy Micro-MOPA,” *The 6th Laser Ignition Conference (LIC’18), OPIC’18*, LICp6-2 (2018).
- Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA**, “Q-Switched Laser Oscillation in Polycrystalline Yb:FAP Anisotropic Laser Ceramics,” *The 6th Laser Ignition Conference (LIC’18), OPIC’18*, LICp6-7 (2018).
- H. H. LIM and T. TAIRA**, “Theoretical Study on the Mechanism of Sub-Ns Giant-Pulse Laser Induced Air-Breakdown Due to Cascade Ionization,” *The 6th Laser Ignition Conference (LIC’18), OPIC’18*, LICp6-8 (2018).
- A. KAUSAS, L. ZHENG and T. TAIRA**, “Optimization of CW Operation in Distributed Face Cooling,” *The 6th Laser Ignition Conference (LIC’18), OPIC’18*, LICp6-9 (2018).
- T. KAWASAKI, V. YAHIA and T. TAIRA**, “Analysis of the Amplifier for PW/sr/cm² Class Micro-MOPA,” *The 6th Laser Ignition Conference (LIC’18), OPIC’18*, LICp6-12 (2018).
- Y. SATO, J. AKIYAMA and T. TAIRA**, “Q-Switched Laser Oscillation in Micro-Domain Controlled Yb:FAP Anisotropic Laser Ceramics,” *CLEO 2018*, SM4N.6 (2018).
- S. W. JOLLY, F. AHR, N. H. MATLIS, V. LEROUX, T. EICHNER, K. RAVI, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, F. X. KAERTNER and A. R. MAIER**, “Towards Millijoule Narrowband Terahertz Pulses Using the Chirp-and-Delay Technique,” *CLEO 2018*, FF1E.3 (2018).
- V. YAHIA and T. TAIRA**, “Gain Aperture for High-Brightness Micro-MOPA,” *8th EPS-QEOD Europhoton Conference*, MoA2.7 (2018).
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “266 nm Generation Using Quasi Phase-Matched Quartz Pumped by a Microchip Laser,” *8th EPS-QEOD Europhoton Conference*, TuP.36 (2018).

B-3) 総説、著書

- S. SAITO and T. KITAGAWA**, “Professors of Department of Molecular Structure,” *Ann. Rev.* 39–52 (2018).
- 平等拓範, 「光技術で“くるま”は変わる: 総論」, *オプトロニクス* **36**, 58–61 (2017).
- 平等拓範, **L. ZHENG**, 石月秀貴, 「1.5 ミクロン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」, *オプトロニクス* **36**, 67–70 (2017).
- 平等拓範, 「100MW に迫る手のひらサイズマイクロチップレーザーの開発」, *オプトロニクス* **37**, 156–161 (2018).
- 佐藤庸一, 平等拓範, 「異方性レーザーセラミックスと配向制御」, *フォトニクスニュース* **4**, 2–6 (2018).
- 平等拓範, 「いつでも・どこでも・だれでも使えるパワーレーザを目指して——高出力ジャイアントパルスDFC 小型集積レーザ——」, *レーザ加工学会誌* **25**, 1–5 (2018).
- B. BOULANGER, S. JIANG, S. MIROV, J. NILSSON, A. PETERSEN, F. ROTERMUND, S. TACCHEO and T. TAIRA**, “Feature Issue Introduction: Advanced Solid-State Lasers 2017,” *Opt. Express* **26**, pp. 11018–11024 (2018). (Opening Article)
- B. BOULANGER, S. JIANG, S. MIROV, J. NILSSON, A. PETERSEN, F. ROTERMUND, S. TACCHEO and T. TAIRA**, “Feature Issue Introduction: Advanced Solid-State Lasers 2017,” *Opt. Mater. Express* **8**, pp. 1246–1252 (2018). (Opening Article)

Y. SATO and T. TAIRA, “Report on OPIC the 6th Laser Ignition Conference 2018 (LIC’18),” *The Review of Laser Engineering* **46**, 537–538 (2018). (Special Issue on Biological and Chemical Sensing Applications Based on Nano-Micro Optics)

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

平等拓範, 「レーザーエンジン点火からのユビキタス・パワーレーザー」, 光科学フォーラムサミット「光科学による新たな産業応用」, 大阪大学光科学センター, 科学技術館, 東京, 2017年11月.

平等拓範, 「マイクロ固体フォトリソによるジャイアントパルスレーザー: マイクロドメインの量子状態制御による新しい方式の提案」, 日本学術振興会第154回先進セラミックス第124委員会, 東京工業大学田町キャンパス, 東京, 2017年11月.

T. TAIRA and H. ISHIZUKI, “Quantum Design of Micro-Domains for Giant Pulse Lasers,” 13th Laser Ceramics Symposium (LCS2017), Fryazino (Russia), December 2017.

平等拓範, 「国際会議報告 Photonics West 報告」, 光産業技術振興協会第4回光材料・応用技術研究会, 中央大学後楽園キャンパス, 東京, 2018年3月.

平等拓範, 「自動車へのレーザー応用最前線——エンジン点火からLiDAR, ヘッドライトまで——」, レーザー学会学術講演会第38回年次大会, 京都市勧業館みやこめっせ, 京都, 2018年1月.

平等拓範, 「次世代ハイパワーレーザー開発2——ジャイアントマイクロフォトリソによるユビキタス・パワーレーザー——」, 「レーザーエンジン点火向けマイクロチップレーザー励起用高出力VCSELモジュール」, レーザー学会学術講演会第38回年次大会, 京都市勧業館みやこめっせ, 京都, 2018年1月.

M. HEMMER, G. CIRMI, K. RAVI, F. AHR, L. ZAPATA, A.-L. CALENDRON, H. CANKAYA, S. W. JOLLY, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, N. MATLIS, A. R. MAIER and F. X. KAERTNER, “Frequency-Shifted Sources for Terahertz-Driven Linear Electron Acceleration,” LASE, SPIE Photonics West 2018, San Francisco, California (U.S.A.), January 2018.

T. TAIRA, “Opening Remarks,” Joint Session LIC+PLD+SLPC, The 6th Laser Ignition Conference (LIC’18), OPIC’18, Yokohama (Japan), May 2018.

T. TAIRA, “Opening Remark,” The 6th Laser Ignition Conference (LIC’18), OPIC’18, Yokohama (Japan), May 2018.

Y. SAKURAI, Y. HOTTA, R. OTOWA, M. NISHITATENO, L. ZHENG, H. YAMAMOTO and T. TAIRA, “One-Shot 3D Giant-Pulse Micro-Laser Processing by LCOS Direct Control,” Joint Session LIC+PLD+SLPC, The 6th Laser Ignition Conference (LIC’18), OPIC’18, Yokohama (Japan), May 2018.

平等拓範, 「手のひらに乗る高強度レーザーが世界を変える技術イノベーション——光が拓く新しいエネルギーから生体応用まで——」, 第16回幸田プレステージレクチャーズ, 幸田プレステージレクチャーズ運営事務局, 幸田町民会館つばきホール, 愛知, 幸田, 2018年6月.

Y. SATO and T. TAIRA, “Microchip Lasers,” Photonics North 2018, Montreal, Quebec (Canada), June 2018.

T. TAIRA, “Giant Micro-Phononics Toward Ubiquitous Power Lasers,” 7th International Conference on Laser Peening and related Phenomena (LSP2018), Singapore, June 2018.* (Keynote Lecture)

T. TAIRA, “Giant Micro-Photonics for Tiny Integrated Power Laser,” 6th IAPLE Annual Conference (IAPLE 2018), Cape Town (South Africa), July 2018.* (Plenary Keynote)

T. TAIRA, “Micro Domain and Boundary Control for Ubiquitous Power Laser,” Ceramic and Crystal Materials for Optics and Photonics, Materials Science & Technology 2018 (MS&T18), Columbus, Ohio (U.S.A.), October 2018.

平等拓範, 「レーザーの自動車・移動体応用~ユビキタス・パワーレーザーからの提案~」, 日本光学会第23回レーザーディスプレイ技術研究会, 東京大学生産技術研究所, 東京, 2018年7月.

平等拓範,「100MW に迫る手の平サイズのサブナノ秒マイクロチップレーザー」, ImPACT シンポジウム「ImPACT が拓く未来の光科学」, JST 東京本部別館, 東京, 2018 年 8 月.

平等拓範,「産業用レーザーの高出力化 (CLEO 情報含む)」, 光産業技術振興協会第 2 回光材料・応用技術研究会, (株)日本レーザー本社, 東京, 2018 年 8 月.

吉田光宏, 周 翔羽, 張 飏, 本田洋介, 平等拓範, 石月秀貴,「高強度レーザーによる高電界加速器の開発」, 第 79 回応用物理学会秋季学術講演会, 名古屋国際会議場, 愛知, 名古屋, 2018 年 9 月.

永田 毅, 緒方大志, 岡田敏幸, 平等拓範,「幅広い加工用途への応用を目指したマイクロチップレーザ」, 第 79 回応用物理学会秋季学術講演会, 名古屋国際会議場, 愛知, 名古屋, 2018 年 9 月.

若井田育夫, 大場弘則, 池田裕二, 作花哲夫, 平等拓範,「福島第一原子力発電所廃止措置のためのレーザー分析技術」, 第 79 回応用物理学会秋季学術講演会, 名古屋国際会議場, 愛知, 名古屋, 2018 年 9 月.

H. H. LIM and T. TAIRA, “Mechanism of Pulse Width Scaling Law of Laser Induced Breakdown Threshold in Air,” Symposium on Applications of Advanced Measurement Technologies SAAMT2018 & Post-ASLIBS2017 International Symposium, Tokushima (Japan), September 2018.* (Keynote Speech)

K. TAMURA, H. OHBA, M. SAEKI, T. TAGUCHI, H. H. LIM, T. TAIRA and I. WAKAIDA, “Study of Microchip Laser Properties for The Remote Inspection Using Laser-Induced Breakdown Spectroscopy,” Symposium on Applications of Advanced Measurement Technologies SAAMT2018 & Post-ASLIBS2017 International Symposium, Tokushima (Japan), September 2018.* (Keynote Speech)

H. OHBA, K. TAMURA, M. SAEKI, T. TAGUCHI, H. H. LIM, T. TAIRA and I. WAKAIDA, “Fiber Optic LIBS Measurement Using Nd:YAG Ceramic Micro-Laser,” Symposium on Applications of Advanced Measurement Technologies SAAMT2018 & Post-ASLIBS2017 International Symposium, Tokushima (Japan), September 2018.* (Keynote Speech)

B-5) 特許出願

特願 2018-006680,「Qスイッチレーザー装置」, 平等拓範, バンダリ ラケシュ (自然科学研究機構), 2018 年.

特願 2018-010560,「光学素子の製造方法及び光学素子」, 平等拓範, カウシャス アルヴィダス (自然科学研究機構), 2018 年.

特願 2018-092757,「レーザー装置」, 安原 亮, 平等拓範 (自然科学研究機構), 2018 年.

特願 2018-095608,「物質生成方法」, 平等拓範, カウシャス アルヴィダス (自然科学研究機構), 2018 年.

B-6) 受賞, 表彰

斎川次郎, 応用物理学会北陸支部発表奨励賞 (1998).

平等拓範, 第 23 回 (社) レーザー学会業績賞 (論文賞) (1999).

平等拓範, 第 1 回 (財) みやぎ科学技術振興基金研究奨励賞 (1999).

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

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

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

平等拓範, 文部科学省文部科学大臣賞 (第 30 回研究功績者) (2004).

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

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

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

平等拓範, 第 24 回光産業技術振興協会櫻井健二郎氏記念賞 (2008).

秋山 順, 浅野秀文, 岩井一彦, 浅井滋生, 日本金属学会第 56 回論文賞 (2008).

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

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

平等拓範, 米国光学会 (OSA) フェロー (2010).

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

平等拓範, 米国電気電子学会 (IEEE) シニア・メンバー (2011).

平等拓範, 国際光工学会 (SPIE) フェロー (2012).

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

平等拓範, 米国電気電子学会 (IEEE) フェロー (2014).

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

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).

Y. SATO, The 6th Laser Ignition Conference 2018 (LIC'18), The Best Poster Presentation (2018).

V. YAHIA, The 6th Laser Ignition Conference 2018 (LIC'18), The Best Poster Presentation (2018).

T. TAIRA, The International Academy of Photonics & Laser Engineering (IAPLE) フェロー (2018).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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

レーザー学会研究会委員 (1999–).

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

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

光産業技術振興協会光材料・応用技術研究会幹事 (2004–).

(独)新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)評価委員 (2005–2006), 技術委員 (2011–2020), 事前書面審査 (2013–2018).

レーザー学会評議員 (2005–).

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

米国光学会 Optical Society of America (OSA) 非線形光学テクニカル・グループ議長 (2008–2012).

応用物理学会日本光学会レーザーディスプレイ技術研究グループ顧問 (2008–2012), 実行委員 (2012–).

財団法人光産業技術振興協会多元技術融合光プロセス研究会幹事 (2009–2018).

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ンクス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ンクス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).
 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 (EPE111) 国際会議委員会共同議長 (2013–2014).
 応用物理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).
 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).
 5th Laser Ignition Conference (LIC' 17) 国際会議プログラム委員会議長 (2016–2017).
 Pacific Rim Laser Damage 2018 (PLD2018) 国際会議国際委員会委員 (2016–2017).
 Optics & Photonics International Congress 2018 (OPIC2018), Advanced Laser & Photon Source (ALPS2018), 国際会議プログラム委員会委員 (2017–2018).
 Optics & Photonics International Congress 2018 (OPIC2018) 国際会議組織委員会委員 (2017–2018).
 The 13th Pacific Rim Conference on Ceramic and Glass Technology (PACRIM 13) 組織委員会委員 (2017–2019).

(社)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(主査)(2017–2018).

First International Conference on Optics, Photonics and Lasers (OPAL'2018) 国際会議プログラム委員会委員(2017–2018).

Mid-Infrared Coherent Sources 2018 (MICS 2018) テクニカル・プログラム委員会委員(2017–2018).

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, 2015–2018).

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).

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).

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-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 (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ー」,研究統括者 平等拓
範(2012年–2013年).

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

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

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

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

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

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

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)「レーザー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).

文部科学省平成30年度科学技術試験研究委託事業(Q-LEAP)「先端レーザーイノベーション拠点「次世代アト秒レーザー
光源と先端計測技術の開発」部門」,「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」(②a.10KHz 赤外OPCPA 光源の
開発),再委託(東京大学),平等拓範(2018年–2019年).

B-11) 産学連携

(株)コンボン研究所,「マイクロ固体フォトンクスの基礎研究」,平等拓範(2018年).

(株)村田製作所,「水晶波長変換デバイスの研究」,平等拓範(2018年).

(株)豊田中央研究所,「マイクロチップレーザーを活用した材料加工技術の開発」,平等拓範(2018年).

C) 研究活動の課題と展望

先端的レーザー光源の中で、特にビーム高品質化(空間特性制御)ならびに短パルス化(時間特性制御)などの高輝度化、そ
してスペクトルの高純度化を広い波長領域(スペクトル特性制御)でコンパクト化と同時に実現することは、極めて重要な課
題である。一方、極限的な粒子加速が期待されるレーザー加速では、物質の性質を原子・分子レベルで解明し、さらに化
学反応などの超高速の動きを捉えることができ、広範な分野の最先端研究に利用される加速器、特にX線自由電子レーザー
SACLA をトレーラーサイズにまで小型化する事が期待されている。しかし、その加速のための高強度レーザーが非常に大
型化するため深刻な問題となっている。このようなことからマイクロ固体フォトンクスへの期待が高まっている。今後、レーザー
加速への寄与が望める先端レーザー科学を、別途、社会連携研究により製造、医療、環境・エネルギー問題などに展開し、
基礎研究の推進が社会貢献に繋がることを検証して行きたい。

*) 2018年10月1日理化学研究所放射光科学研究センターグループディレクター

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，この手法を赤外イメージングに応用することを行った。
- b) 前年度は，Si 薄膜にサブサイクル中赤外光パルスを集光して，高次高調波が発生することを示したが，本年度は，Si 薄膜を非線形媒質として，サブサイクル中赤外光パルスの評価が行えることを示した。800 nm の参照光（ ω_1 ）とサブサイクル中赤外光パルス（ ω_0 ）を Si 薄膜上で重ね合わせると，400–500 nm 付近に信号（ ω_2 ）が得られ，それが四光波混合の信号（ $\omega_1 + \omega_1 - \omega_0 \rightarrow \omega_2$ ）に対応していることを示した。この信号をもとに，サブサイクル中赤外光パルスのパルス幅を求めることができる。
- c) 以前，チャープパルス増幅を基本としたトリウム添加 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 fs のパルスが得られていたが，それをさらに増幅する再生増幅器の開発を行った。最終的には 1.4 mJ のパルスエネルギーをもった 360 fs のパルスを発生させることができた。このレーザーはさらに長い赤外パルスを発生させる光源として有用と考えられる。また，前年度に開発した 50 fs のパルスを発生するファイバー増幅器の出力を光源として，3 光子顕微鏡の開発を行った。1800 nm の励起光パルスを光源とした顕微鏡を構築し，試料に照射したところ，650 nm 程度の蛍光が得られ，3 光子励起による蛍光の信号が得られた。

B-1) 学術論文

H. SHIRAI, F. KUMAKI, Y. NOMURA and T. FUJI, “High-Harmonic Generation in Solids Driven by Sub-Cycle Mid-Infrared Pulses from Two-Color Filamentation,” *Opt. Lett.* **43**, 2094–2097 (2018).

S. A. REZVANI, M. SUZUKI, P. MALEVICH, C. LIVACHE, J. V. DE MONGOLFIER, Y. NOMURA, N. TSURUMACHI, A. BALTUŠKA and T. FUJI, “Millijoule Femtosecond Pulses at 1937 nm from a Diode-Pumped Ring Cavity Tm:YAP Regenerative Amplifier,” *Opt. Express* **26**, 29460–29470 (2018).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

Y. NOMURA and T. FUJI, “Ultrafast Thulium-Doped Fiber Amplifier for Multiphoton Microscopy,” *The 7th Advanced Lasers and Photon Sources*, ALPS13-D2-3 (2018).

S. A. REZVANI, M. SUZUKI, P. MALEVICH, C. LIVACHE, J.-V. DE MONTGOLFIER, Y. NOMURA, N. TSURUMACHI, A. BALTUSKA and T. FUJI, “2 Gigawatt Peak Power Source Centered at 1940 nm from a Diode-Pumped Ring Cavity Tm:YAP Regenerative Amplifier,” *JSAP-OSA Joint Symposia 2018*, 21a-221B-5 (2018).

S. A. REZVANI, M. SUZUKI, P. MALEVICH, C. LIVACHE, J.-V. DE MONTGOLFIER, Y. NOMURA, N. TSURUMACHI, A. BALTUSKA and T. FUJI, “Gigawatt Peak Power Centered at 1940 nm from a Diode-Pumped Ring Cavity Tm:YAP Regenerative Amplifier,” *Advanced Solid State Lasers*, AM5A.5 (2018).

H. SHIRAI, F. KUMAKI, Y. NOMURA and T. FUJI, “High-Harmonic Generation in Solids Driven by Sub-Cycle Mid-Infrared Pulses from Laser Filamentation,” *XXI International Conference on Ultrafast Phenomena*, THU.PO.33 (2018).

H. SHIRAI, F. KUMAKI, Y. NOMURA and T. FUJI, “High-Harmonic Generation from Crystalline Silicon Driven by Sub-Cycle Mid-Infrared Pulses,” *CLEO:QELS Fundamental Science*, FF2P.2 (2018).

B-4) 招待講演

Y. NOMURA, “Development of an ultrafast 2 μm laser system for multiphoton microscopy,” Interhierarchical understanding of materials and life through molecular observation, Okazaki (Japan), March 2018.

Y. NOMURA and T. FUJI, “Femtosecond light source at 2 μm based on thulium-doped ZBLAN fiber,” 11th Asia Pacific Laser Symposium, Sheraton Xi'an North City Hotel, Xi'an (China), May 2018.

T. FUJI, “Complete waveform characterization of mid-infrared ultrashort pulses,” 2nd URSI Atlantic Radio Science Meeting (AT-RASC), Gran Canaria (Spain), May 2018.

T. FUJI, “High harmonic generation in Si driven by sub-cycle mid-infrared source based on twocolor laser filamentation,” COFIL2018, Geneva (Switzerland), June 2018.

藤 貴夫, 「究極の光を作る」, 市民公開講座第 116 回分子科学フォーラム, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2018 年 3 月.

T. FUJI, “Development and application of sub-cycle mid-infrared source based on two-color filamentation,” JSAP-OSA Joint Symposia 2018, Nagoya (Japan), September 2018.

野村雄高, 藤 貴夫, 「ツリウム添加 ZBLAN ファイバーによる 2 μm 帯フェムト秒レーザーシステム」, レーザー学会第 525 回研究会「ファイバレーザー技術」, 名古屋大学, 名古屋, 2018 年 11 月.

B-6) 受賞, 表彰

藤 貴夫, 日本光学会奨励賞 (1999).

藤 貴夫, 大阪大学近藤賞 (2008).

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

野村雄高, 自然科学研究機構若手研究者賞 (2016).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

レーザー学会「ファイバレーザー技術」専門委員会委員 (2015–2017). (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)

レーザー学会「ファイバーレーザー技術」専門委員会幹事 (2018-).

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 (2017–2018). (野村雄高)

ICO24 国際会議プログラム委員 (2017).

Ultrafast Optics 2017 国際会議プログラム委員 (2017).

CLEO/USA2018 座長 (2018).

Advanced Solid State Lasers: Sources プログラム委員 (2018-). (野村雄高)

レーザー学会学術講演会第 39 回年次大会プログラム委員 (2018-).

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 (2017–2018).

B-8) 大学での講義, 客員

Vienna University of Technology (Vienna), “Development and application of sub-cycle MIR source generated through filamentation,” March 6th, 2018.

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「光物理」, 2018 年 7 月 1 日–9 月 30 日.

総合研究大学院大学物理科学研究科, テーマ型レクチャー「先端レーザー基礎演習」, 2018 年 9 月 11 日–13 日.

National Chiao Tung University (Hsingchu), “Sub-cycle mid-infrared source based on laser filamentation,” October 4th, 2018.

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 μ m 超短パルスレーザー光源の開発」, 野村雄高 (2015年–2017年).

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

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、固体結晶を用いて可能であることを示した。このことより、比較的、強度の低いパルスについても、パルス評価が行えることを示した。ファイバーレーザーの開発では、本研究室で開発された光源を実際に3光子顕微鏡に応用できることを示した。また、ファイバーレーザー出力を、固体レーザーを基本とした増幅システムで増幅し、高強度パルスを得ることができた。今後、高強度赤外光パルス発生や、多光子顕微鏡など、様々な分野へ応用することを考えている。

6-8 特別研究部門

藤 田 誠（卓越教授）（2018 年 4 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：錯体化学，有機化学

A-2) 研究課題：

- a) 遷移金属を活用した巨大中空構造の自己集合構築
- b) 自己集合ナノ空間における新機能創出
- c) 細孔性高分子錯体の自己集合構築と空間機能創出

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) M_nL_{2n} 型拡張 Goldberg 多面体が $Q = h^2 + k^2$ (h, k は負でない整数) を満たす系列で存在することを明らかにし， $Q = 5$ ($M_{30}L_{60}$)， $Q = 8$ ($M_{48}L_{96}$) を理論予測に基づき自己集合構築した。
- b) 自己集合構築した巨大中空ケージ内にタンパクを包接した。包接されたタンパクは高い安定性を示し，高温条件や有機溶媒中でもフォールディングが崩れなかった。また，一度有機溶媒中でフォールディングが崩れたタンパクも，水性条件に戻すことでリーフォールディングが観測された（シャペロン効果）。
- c) 結晶スポンジ法により，約 30 件の天然化合物について，絶対配置を含む構造決定に成功した。また，天然物の抽出混合物から，結晶スポンジ法を用いて親和性スクリーニングを行う手法を確立し，超速の天然物ライブラリ構築を可能にした。

B-1) 学術論文

T. MURASE, C. MATSUDA, K. ADACHI, T. SAWADA and M. FUJITA, “Triple Photochemical Domino Reaction of a Tetrafluorostilbene Terminating in Double Fluorine Atom Transfer,” *Commun. Chem.* **1**, 97 (6 pages) (2018). doi:10.1038/s42004-018-0099-7

T. MITSUHASHI, T. KIKUCHI, S. HOSHINO, M. OZEKI, T. AWAKAWA, S.-P. SHI, M. FUJITA and I. ABE, “Crystalline Sponge Method Enabled the Investigation of a Prenyltransferase-terpene Synthase Chimeric Enzyme, Whose Product Exhibits Broadened NMR Signals,” *Org. Lett.* **20**, 5606–5609 (2018). doi:10.1021/acs.orglett.8b02284

M. IWANE, T. TADA, T. OSUGA, T. MURASE, M. FUJITA, T. NISHINO, M. KIGUCHI and S. FUJII, “Controlling Stacking Order and Charge Transport in Π -Stacks of Aromatic Molecules Based on Surface Assembly,” *Chem. Commun.* **54**, 12443–12446 (2018). doi:10.1039/C8CC06430J

M. YAMAGAMI, T. SAWADA and M. FUJITA, “Synthetic β -Barrel by Metal-Induced Folding and Assembly,” *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 8644–8647 (2018). doi:10.1021/jacs.8b04284

S. S. GOH, S. GUDUGUNTLA, T. KIKUCHI, M. LUTZ, E. OTTEN, M. FUJITA and B. FERGINGA, “Desymmetrization of *meso*-Dibromocycloalkenes through Copper(I)-Catalyzed Asymmetric Allylic Substitution with Organolithium Reagents,” *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 7052–7055 (2018). doi:10.1021/jacs.8b02992

K. KAI, M. SOGAME, F. SAKURAI, N. NASU and M. FUJITA, “Collimonins A–D, Unstable Polyynes with Antifungal or Pigmentation Activities from the Fungus-Feeding Bacterium *Collimonas fungivorans* Ter331,” *Org. Lett.* **20**, 3536–3540 (2018). doi:10.1021/acs.orglett.8b01311

S. S. GOH, P. A. CHAMPAGNE, S. GUDUGUNTLA, T. KIKUCHI, M. FUJITA, K. N. HOUK and B. L. FERINA, “Stereospecific Ring Contraction of Bromocycloheptenes through Dyotropic Rearrangements via Nonclassical Carbocation–Anion Pairs,” *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 4986–4990 (2018). doi:10.1021/jacs.8b00821

M. UESAKA, Y. SAITO, S. YOSHIOKA, Y. DOMOTO, M. FUJITA and Y. INOKUMA, “Oligoacetylacetones as Shapable Carbon Chains and Their Transformation to Oligoimines for Construction of Metal–Organic Architectures,” *Commun. Chem.* **1**, 23 (7 pages) (2018). doi:10.1038/s42004-018-0021-3

Y. TAMURA, H. TAKEZAWA, Y. DOMOTO and M. FUJITA, “Microgram-Scale X-Ray Structure Analysis of Small Molecules via High-throughput Co-Crystallization,” *Chem. Lett.* **47**, 617–619 (2018). doi:10.1246/cl.180082

N. WADA, R. KERSTEN, T. IWAI, S. LEE, F. SAKURAI, T. KIKUCHI, D. FUJITA, M. FUJITA and J.-K. WENG, “Crystalline Sponge-Based Structural Analysis of Crude Natural Product,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **57**, 3671–3675 (2018). doi:10.1002/anie.201713219

B-4) 招待講演

藤田 誠,「結晶スポンジ法：有機合成, 天然物化学, 創薬研究への応用」, 第 53 回天然物化学談話会, 伏尾温泉不死王閣, 池田, 2018 年 7 月.

藤田 誠,「結晶スポンジ法：有機合成, 天然物化学, 創薬・食品研究への応用」, 日本プロセス化学会 2018 サマーシンポジウム, 東京, 2018 年 7 月.

藤田 誠,「化学と幾何学——多面体の定理を活用したものづくり——」, 2018 年度大学学部研究会, TKP ガーデンシティ品川, 東京, 2018 年 8 月.

藤田 誠,「結晶スポンジ法による結晶構造解析の最新動向」, 興和株式会社東京創薬研究所, 東村山, 2018 年 9 月.

藤田 誠,「結晶スポンジ法とその創薬研究への応用」, 創薬等ライフサイエンス研究支援基盤事業平成 30 年度 BINDS 公開シンポジウム, よみうり大手町ホール, 東京, 2018 年 9 月.

M. FUJITA, “Self-assembly of Archimedean/Non-Archimedean Solids under Mathematical,” 第 18 回日韓有機金属・錯体化学シンポジウム, 四日市商工会議所ホール, 四日市, 2018 年 11 月.

藤田 誠,「結晶スポンジ法：天然物化学, 創薬研究への応用」, 平成 30 年度後期(秋季)有機合成化学講習会, 日本薬学会 長井記念館長井記念ホール, 東京, 2018 年 11 月.

藤田 誠,「結晶スポンジ法:天然物化学, 創薬研究への応用」, 第 402 回 CBI 学会講演会, 東京工業大学キャンパスイノベーションセンター (CIC 田町)1 階国際会議室, 東京, 2019 年 1 月.

藤田 誠,「結晶スポンジ法：天然物化学, 創薬研究への応用」, 日本薬学会第 139 年会, 幕張メッセ, ホテルニューオータニ 幕張, 千葉, 2019 年 3 月.

M. FUJITA, “The crystalline sponge method: Absolute structure determination and application to asymmetric and natural product studies,” University of Edinburgh, Edinburgh (U.K.), April 2018.

M. FUJITA, “Self-assembly goes far beyond,” The Grand Challenges in the Chemical Sciences, Jerusalem (Israel), June 2018.

M. FUJITA, “Addressing the Absolute Determination of Enantiopurity Using the Crystalline Sponge Method,” Chirality 2018, New Jersey (U.S.A.), June 2018.

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly: From the Origins to the Latest Advances,” ISNSC2018, Dresden (Germany), July 2018.

M. FUJITA, “Molecular Confinement Effects in Self-Assembled Cages for Catalyst Design,” ISHC XXI, Amsterdam (Nederland), July 2018.

M. FUJITA, “Crystalline Sponge Method for Synthetic and Natural Product Studies,” Curious 2018 Future Insight, Darmstadt (Germany), July 2018.

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly: From the Origins to the Latest Advances,” ACIN2018, Namur (Belgium), July 2018.

M. FUJITA, “Coordination self-assembly: From origins to the latest advances,” Crystalline sponge method: Applications to synthetic and natural product studies, Sovay (France), July 2018.

M. FUJITA, “Crystalline Sponge Method for Natural Product Studies,” GRC, Newry (U.S.A.), August 2018.

M. FUJITA, “Coordination Self-Assembly: From the Origins to the Latest Advances,” ISAMS2018, Shanghai (China), October 2018.

B-6) 受賞, 表彰

藤田 誠, ウルフ賞化学部門 (2018).

藤田 誠, 千葉大学特別荣誉教授 (2018).

藤田 誠, 廈門大学 Lujiaxi レクチャーシップ (2018).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会論説委員 (2019–).

錯体化学会国際交流委員 (2013–).

錯体化学会理事 (2015–), 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), 事務局 (2006).

学会の組織委員等

第 43 回錯体化学国際会議組織委員会 (会期: 2018 年 7 月 29 日–8 月 4 日) 副委員長 (2018).

学会誌編集委員

Chemical Science 誌, Editorial Board (2018–).

Acc. Chem. Soc. 誌, Editorial Board (2018–).

Bull. Chem. Soc. Jpn. 誌, Honorary Editorial Board (2018).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構 ACCEL 研究,「自己組織化技術に立脚した革新分子構造解析」, 藤田 誠 (2014年–2019年).

日本医療研究開発機構創薬基盤推進研究事業,「結晶スポンジ法を活用する超速天然物ライブラリ構築と活性スクリーニング」, 藤田 誠 (2018年–2023年).

C) 研究活動の課題と展望

新しい空間には新しい化学が宿る。我々のグループでは、この信念に基づき、従来の化学において「到達不可能であった空間」や「概念的に考えられていなかった空間」を構築し、その未踏の世界での新しい化学を探索する。具体的には、①配位結合駆動の自己集合により、前例のない>100成分、>100Å 径の巨大中空錯体を合成し、その空間での化学を開拓する。対象となる物質として、中空錯体に包接したタンパク分子を扱う。タンパク包接を基軸に、タンパクの安定化、機能の向上、改変、さらにはタンパク種類によらない結晶化手法の開発など、化学のみならず生化学から構造生物学にまで波及する研究を行う。②結晶内空間での溶液化学という視点の研究から生まれた「結晶化を必要としないX線結晶構造解析手法(結晶スポンジ法, 以下CS法)」を用いて、実現不可能であった化学を実現し新分野を創出する。とりわけ、ゲノム情報マイニング技術とスポンジ法を組み合わせ、合成生物学研究を大幅に加速し、合成化学と合成生物学を融合させた新しい合成のパラダイムを構築する。

6-9 安全衛生管理室

戸村正章（助教）（2004年6月1日着任）

A-1) 専門領域：有機化学，構造有機化学，有機固体化学

A-2) 研究課題：

- a) 弱い分子間相互作用による分子配列制御と機能性分子集合体の構築
- b) 新しい機能性電子ドナーおよびアクセプター分子の開発
- c) 分子研化学物質管理システムの構築とその運用管理

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 我々は、以前より、1,2,5-チアジアゾール環を含む化合物の結晶構造において、van der Waals 半径の和より短い分子間 S...N 相互作用による二量体や分子テープなど興味ある分子集合体構造を見出してきた。そこで今回、周辺部に硫黄および窒素原子を持ち水素原子を含まないという興味深い分子構造である [1,3] ジチオロ [4,5-c][1,2,5] チアジアゾール-5-チオンを合成し、その分子・結晶構造を X 線結晶構造解析により決定した。その結果、分子はほぼ平面で、結晶構造中に数多くの短い分子間 S...S, S...N 相互作用を見出した。
- b) 我々は先に、オキサジアゾール環を構成要素とする大環状四量体が超分子ナノチューブを形成することを *Nano Letters* 誌に報告した。ここ数年、この化合物における置換基効果を種々検討し続けており、分子集合体配列が置換基に大きく依存することを X 線結晶構造解析により明らかにした。
- c) 高等研究機関における総合的かつ安全適正な化学物質管理の必要性は増大している。分子研における化学物質の電子の一元管理を目的として、2014 年に化学物質管理システムが導入され、一貫してその運用に携わってきた。また、管理システムのデータを利用して有害物質等の使用・保管状況を迅速かつ効率的に把握、管理する手法も開発した。今年度からは基生研でも運用が開始され、適宜アドバイスをを行っている。

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会コンピューター統括委員会 CSJ-Web 統括的管理運営委員会委員 (2001–2002).

日本化学会広報委員会ホームページ管理委員会委員 (2003–2012).

田 中 彰 治 (助教) (1989 年 4 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：非ベンゼン系芳香族化学，分子スケールエレクトロニクス

A-2) 研究課題：

- a) 量子効果素子回路の単一分子内集積化法の開拓
- b) 単一分子架橋系の電荷輸送特性の解明と制御法の開拓

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 本課題の標的は、**SoM (System-on-a-Molecule)**，即ち「強固な共有結合による，量子効果素子回路の単一分子骨格内への集積化」である。その実現を目指し，当研究室では電子活性なヘテロ5員環を主骨格材として「単電荷素子の基本エレメント群を単一分子内に集積化するプロセス」を種々確立してきた。しかし得られた多端子型分子の基板表面上での構造を STM 法により解析した結果（横浜市大・横山 G），五員環ベースの系では直鎖構造が剛性不足なため，機能発現のための最適構造を自律的には取れないという弱点が判明した。この問題を解決するため，**剛直な外骨格分子**を構築し，そこに5員環ベースの多端子型分子群を組み込むことで，その形状最適化と相対位置の精密制御を行う戦略を立案した。昨年度，剛直性外骨格の構築用として，嵩高いブロック型置換基（分子鎖間会合を阻害し，可溶性を強化）を導入したオリゴフェニレンエチニレン系コア分子ユニット（0.3–1nm 長）を新規開発した。今年度は，この分子シリーズのサイズ拡張を試みたが，分子鎖長が増大するに従い，接合反応の副生物（末端アルキン二量体）の分離が困難となる問題に直面した。対策を検討した結果，各種シリル系保護基を活用したクロマト-フェーズラベリング法が副生物の効率的分離に有効であることを見だし，1–10nm 長級の剛直性分子ブロック群の逐次精密合成を可能とした。今後，これらを原料とし 100nm 長クラスの巨大分子ブロック群の合成を行う。
- b) 本課題では，**巨大分子系における電荷輸送特性の解明と制御法の確立**を目指す。大型分子鎖の立体配座と単一分子伝導度との相関を明らかにするため，阪大産研・家 G で開発された「**共平面型**／被覆オリゴチオフエン」と，当研究室の「**非共平面型**／被覆オリゴチオフエン」の単一分子伝導度を同一条件で比較検討した（阪大・夢田 G，家 G）。結果，トンネル伝導が主となる短鎖長領域（1–5 nm）では**非共平面型**が，ホッピング伝導が主となる長鎖長領域（5–10 nm）では**共平面型**がより高い伝導性を示すことが分った。即ち，低分子系（1 nm 以下）において「共平面性が良好なパイ共役鎖ほど高い単一分子伝導度を示す」ことは実験的に確認されているが，この指針だけでは，1–10nm 長クラスの大型パイ共役鎖の伝導特性を予想できないことになる。現在，この現象の要因を検討中であり，論文誌のレビューアーとも意見を戦わしているところである。

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

分子物質開発研究センター特別シンポジウム「分子スケールエレクトロニクスにおける新規分子物質開発」主催 (1998).

応用物理学会・日本化学会合同シンポジウム「21 世紀の分子エレクトロニクス研究の展望と課題——分子設計・合成・デバイスからコンピュータへ——」日本化学会側準備・運営担当 (2000).

第 12 回日本 MRS 学術シンポジウム：セッション H 「単一電子デバイス・マテリアルの開発最前線～分子系・ナノ固体系の単一電子デバイス～」共同チェア (2000).

First International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics 組織委員 (2001).

第9回分子アーキテクトニクス研究会プログラム委員 (2018).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「単一分子内多重トンネル接合系の精密構築法の開拓」, 田中彰治 (2007年–2008年).

科研費基盤研究(B), 「単電子／正孔トンネルデバイス回路の単一分子内集積化のための分子開発」, 田中彰治 (2010年–2012年).

科研費新学術領域, 「分子アーキテクトニクス：単一分子の組織化と新機能創成」 (代表：埴田博一), 田中彰治 (研究分担者) (2013年–2017年).

科研費基盤研究(C), 「量子構造を持つ分子ワイヤの単一分子伝導計測」, 田中彰治 (研究分担者) (2017年–2019年).

