

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）

三輪 邦之（助教）

藤橋 裕太（特任研究員）

坂本 想一（特任研究員）

JO, Ju-Yeon（特任研究員）

赤羽 厚子（事務支援員）

A-1) 専門領域：理論物理化学

A-2) 研究課題：

a) 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) 近年、非古典光を用いた量子計測技術の分子科学、物質科学への応用に向けた機運が高まりつつある。レーザーなど古典光を用いた分光計測に比して卓越した優位性を有する量子計測技術を開発する上で、光の非古典的性質が果たす役割を明確にする必要がある。本研究課題では、複雑分子系の動的過程を時間分解計測することを念頭に、量子もつれ光子対の非古典相関を利用する量子分光計測の理論研究に取り組んでいる。

特に我々は、①もつれ光子対の発生方法としてポンプ光に CW レーザーを用いたパラメトリック下方変換を、②光学系として Hong-Ou-Mandel 干渉計を用いて、時間分解スペクトルの定式化を行なった。レーザーを用いた分光計測では超短パルスの遅延制御によって時間分解測定を行うが、もつれ光子対の非古典相関を用いることによって同様の時間分解測定が可能となることを見出した。さらに、もつれ光子対の非古典相関が強い極限においては、本手法で得られるスペクトル情報がフォトンエコーなど非線形光学応答として得られる二次元分光スペクトルの情報に等価であることを示した。このことは、光子対の非古典相関がもたらす量子分光計測の優位性を明確に示しているだけでなく、量子分光計測を展開するうえで非古典光をどのようにデザインするべきかについて重要な指針を提供している。量子分光計測の理論基盤を確立することに成功したと言える。

さらに、上記の理論で得られる分光信号の表式に現れる位相整合関数のスペクトル分布が信号解析の分野における sinc フィルタと同様の周波数フィルタとして機能することに着目し、高い時間分解能を維持しつつ周波数領域における高い選択性を得られることを明らかにした。

B-1) 学術論文

Y. FUJHASHI and A. ISHIZAKI, “Achieving Two-Dimensional Optical Spectroscopy with Temporal and Spectral Resolution Using Quantum Entangled Three Photons,” *J. Chem. Phys.* **155**(4), 44101 (13 pages) (2021). DOI: 10.1063/5.0056808

A. ISHIZAKI and G. R. FLEMING, “Insights into Photosynthetic Energy Transfer Gained from Free-Energy Structure: Coherent Transport, Incoherent Hopping, and Vibrational Assistance Revisited,” *J. Phys. Chem. B* **125**, 3286–3295 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c09847

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI, “Generation of pseudo-sunlight via quantum entangled photons and interaction with molecules,” #210 Quantum Coherence in Energy Transfer, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

A. ISHIZAKI, “Probing exciton dynamics with quantum entangled photons,” #201 Modeling exciton and charge dynamics in molecules and clusters toward optoelectronic applications, Pacifichem 2021, Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

石崎章仁, 「量子散逸系として見る光捕集系におけるダイナミクス」, 東京大学物性研究所短期研究会「分子性固体研究の拡がり：新物質と新現象」, 東京大学物性研究所, 柏, 2021年12月.

A. ISHIZAKI, “Probing excited-state dynamics with quantum entangled photons: Correspondence to coherent multidimensional spectroscopy,” 11th Asian Photochemistry Conference (APC2021), online, November 2021.

A. ISHIZAKI, “Investigating excited-state dynamics in molecules with quantum light,” Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA-X 2021), online, October 2021.

石崎章仁, 「量子科学で挑んだ光合成初期過程研究 2008年～2021年」, 量子生命科学会第3回大会受賞者特別講演, オンライン開催, 2021年9月.

A. ISHIZAKI, “Probing excited-state dynamics with quantum entangled photons: Correspondence to coherent multidimensional spectroscopy,” Telluride workshop, “Spatio-Temporal Dynamics of Excitons: Bridging the Gap Between Quantum Mechanics and Applications,” online, June 2021.

石崎章仁, 「量子科学の観点からみる複雑分子系におけるダイナミクス」, お茶の水女子大学2021年度第1回物理教室談話会, オンライン開催, 2021年5月.

石崎章仁, 「量子科学の観点からみる複雑分子系におけるダイナミクス」, 第8回分子性固体オンラインセミナー, オンライン開催, 2021年5月.

藤橋裕太, 「量子科学技術に基づく複雑分子系における動的過程の理論的研究」, 日本物理学会第76回年次大会, オンライン開催, 2021年3月.

B-6) 受賞, 表彰

石崎章仁, 第1回量子生命科学会研究奨励賞 (2021).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

量子生命科学会 学術委員会委員 (2019–2023).

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–).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (B), 「量子分子計測と動力学解析の理論基盤」, 石崎章仁 (2021年–2025年).

科学技術振興機構さきがけ研究「量子技術を適用した生命科学基盤の創出」領域, 「時間分解量子もつれ分光法：理論基盤の構築と生体分子系への応用」, 藤橋裕太 (2019年–2023年).

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).

文部科学省光・量子飛躍フラッグシッププログラム(Q-LEAP),「Flagship プロジェクト: 量子生命技術の創製と医学・生命科学の革新」(代表: 馬場嘉信), 石崎章仁(研究分担者) (2020年–2026年).

文部科学省光・量子飛躍フラッグシッププログラム(Q-LEAP),「基礎基盤研究: 複雑分子系としての光合成機能の解明に向けた多次元量子もつれ分光技術の開発」(代表: 清水亮介), 石崎章仁(研究分担者) (2018年–2023年).

科研費基盤研究(B),「太陽光の効率利用のための励起子・電荷ダイナミックスの基礎理論の構築」(代表: 田村宏之), 石崎章仁(研究分担者) (2018年–2021年).

科研費新学術領域研究(研究領域提案型)「天然光合成系におけるエネルギーフローに関する実験・理論解析」(代表: 橋本秀樹), 石崎章仁(研究分担者) (2017年–2022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進めている。