

4. 研究活動の現状

分子科学研究所は、現在、理論・計算分子科学、光分子科学、物質分子科学、生命・錯体分子科学の四つの研究領域とそれらを繋ぐ協奏分子システム研究センターおよび、メゾスコピック計測研究センターで研究基盤を構築している。協奏分子システム研究センターでは、多重の階層を越えて機能する分子システムを構築することを目的とした研究を展開している。メゾスコピック計測研究センターでは、広い時空間領域で階層間のエネルギー・情報の変換を可視化する新しい計測手法の開発を目指している。このように、分子機能の開発、そして機能を計測する研究を組み合わせることで、分子科学研究所の特徴を活かしつつ、新しい分子科学研究領域の開拓を目指している。また、自然科学研究機構直属の組織「生命創成探究センター」は、岡崎3研究所（基礎生物学研究所、生理学研究所そして分子科学研究所）の研究力を統合した活動を展開している。本年度は、分子科学研究所と生理学研究所、そして生命創成探究センターが合同で新たな研究領域にチャレンジする「スピン生命科学コア」という研究組織を立ち上げた。さらに、極端紫外光研究施設（UVSOR）を始めとする研究施設を擁し、分子の構造と反応と機能についての先鋭的な基礎研究を進め分子の新たな可能性を探っている。

「特別研究部門」では、分子科学分野を世界的に牽引することが期待される卓越教授による研究、分子研の共同利用の施設や設備の高度な利用を進める研究者や、各研究領域の研究を発展的に展開する研究者のクロスアポイントメントによる招へい事業を進めている。「社会連携研究部門」では、産学官の連携研究の推進を目指している。ここでは、コンソーシアムを作り所外からのニーズを反映するオープンイノベーションの拠点として研究室を運営している。「小型集積レーザーコンソーシアム」は、平等拓範特任教授をリーダーとして、民間企業を中心に38団体の会員とともに研究を推進している。

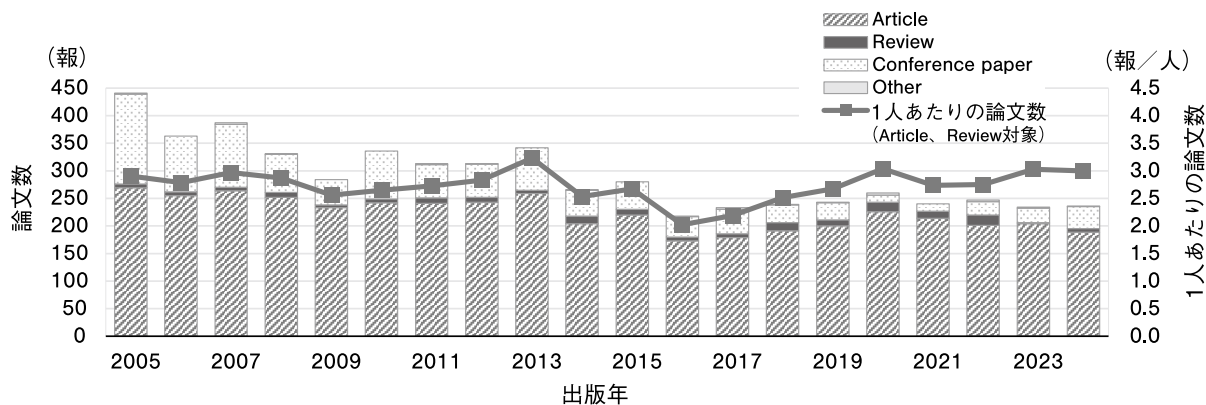
4-1 論文発表状況

分子研では毎年多くの学術論文を発表している。近年は民間の論文データベースが充実してきているため、これを用いたIRを研究力強化戦略室で行っている。ここでは出版論文数^{*1}の年次推移と在籍者1人あたりの原著・総説論文数の推移を示し、所属研究者の活動状況が維持されていることが確認できる。

出版年	Article	Review	Conference paper	Other	在籍者数 ^{*2}
2005	269	7	163	2	95
2006	254	7	101	0	94
2007	264	6	114	3	91
2008	252	9	69	1	91
2009	233	5	46	0	93
2010	242	7	87	0	94
2011	241	10	60	2	92
2012	243	9	60	1	89
2013	259	6	77	0	82
2014	204	14	47	1	86
2015	220	10	50	0	86
2016	173	7	37	1	89
2017	179	7	44	3	85
2018	191	15	32	1	82
2019	200	11	31	1	79
2020	226	17	13	4	80
2021	214	13	13	0	83
2022	201	19	24	3	80
2023	204	2	26	2	68
2024	189	6	40	1	65

* 1 Scopus 調べ（2025 年 4 月 21 日現在）。

* 2 教授、准教授・助教授、主任研究員、助教・助手の総計。教授、准教授は、卓越・特任・クロスアポイントメント・客員教員を含む。



論文数と在籍者数の推移

4-2 メゾスコピック計測研究センター

メゾスコピック計測研究センター（以後「本センター」）は、旧分子制御レーザー開発研究センター（1997年4月設立）からの改組により、2017年4月に設立された。分子科学研究所の研究対象は、広い意味での分子物質であることは設立当初から変わらないが、当初は一つ一つの分子の挙動に重点をおいて注目されていたのが、最近では様々な分子やナノ構造体などがシステムを作って発現する機能・特性の解明と制御、及び新しい機能を持つシステムの構築に重点がシフトしてきている。それによって、分子の物質・エネルギー・情報変換能力を精緻に引き出すことが初めて可能になると考えられる。そのような新しい研究の方向性に対応する一つの方策として、分子科学研究所では2013年4月に協奏分子システム研究センターが設立されたところである。

分子計測の先端的手法では、時間、空間、波長、パワーなどにおいて極限に向かう方向が精力的に推し進められ、大きな成果を上げてきた。そうした手法では、理想化された極限条件下で系に大きなエネルギーの擾乱を与えて素過程の挙動を解析する方法が一般的であった。現在もその方式の重要性に変わりはないが、このような従来型計測法の可能性と限界も少しずつ明らかになってきている。本センターでは、従来の手法とは一線を画した、繊細・広帯域・多次元の計測解析手法で分子システムの挙動・機能のありのままの姿に迫り、また低摂動・超精密制御で新たな量子機能を創出する、革新的実験法の開発が必要という立場をとる。新たな分子能力の創発の現場を、マクロ階層の強靱でロバストな性質と、ミクロ階層の機能に富む特性が絡んだメゾスコピック領域に求め、分子の機能や反応の契機となる過程を明らかにするために、広い時空間領域で階層間のエネルギー・情報の変換を可視化する新発想の計測開発手法を開発する。（ここでいうマクロ、ミクロ、メゾスコピックは、相対的な階層であり、扱う系によって実際のスケールは異なる。また空間だけではなく、時間領域についてもメゾスコピック領域が考えられる。）これらを通じて、分子の素過程が系全体の大域的な機能を生む機構を解明する研究などに主眼を置いて推進する。この目的のために、旧分子制御レーザー開発研究センターの研究業績・資産を引き継ぎながらも、分子科学研究所の基盤となる四つの領域から関連する研究を遂行する研究者の参画を得て、それらをまたぐ領域横断的なセンターとして設置することとした。これにより、同様な組織構成を取った協奏分子システム研究センターとともに、分子物質のシステムとしての挙動・機能を研究する両輪として研究活動を展開することが可能となった。

このような新しい分子計測制御法を開発・利用していくためのセンターとして、2017年4月の発足時に以下の3部門と担当教員を置くこととした。

(1) 物質量子計測研究部門：大森賢治（教授，光分子科学研究領域からの兼任），信定克幸（准教授，理論・計算分子科学研究領域からの兼任）

(2) 繊細計測研究部門：岡本裕巳（教授・センター長，専任），平等拓範（准教授，専任）

(3) 広帯域相関計測解析研究部門：飯野亮太（教授，生命・錯体分子科学研究領域からの兼任），藤 貴夫（准教授，専任）

専任研究グループに所属する助教等のスタッフも本センターの各研究部門に所属する。また、旧分子制御レーザー開発研究センターに所属した技術職員も、引き続き本センターに所属させる。今後分子科学研究所に採用される教授・准教授も、状況に応じて上記のいずれかの部門の専任または兼任ポストを占めることが想定されている。それぞれの部門の任務は、(1) 蓄積のある光観測・制御法を先鋭化し、更に量子系の構造変形を操作することによって、新しい量子相を作り出して制御し、量子情報処理など新規な分子の能力を引き出す；(2) 時空間を分解した計測法，増強光場を利用した超高感度・並列計測等による低摂動で繊細な分子計測法等を開発し，分子のありのままの姿を非破壊的に観測する；(3) 多変数スペクトロスコピー・多次元解析手法，高分解能広帯域計測法とその解析法を開発して分子の能力とそれを司る物理過程を明らかにし，従来とは質の異なる情報を獲得する革新的手法を開拓する；等を目指している。なお，信定准教授は2018年1月に残念ながら逝去された。平等准教授は2018年10月に理化学研究所（放射光科学研究センター）に，また藤准教授は2019年

4月に豊田工業大学に、それぞれ転出した。これらの研究領域の扱いについては今後の検討となる。一方、2018年5月には杉本敏樹准教授（物質量子計測研究部門）が物質分子科学研究領域からの、また2019年11月には江原正博教授（繊維計測研究部門）と南谷英美准教授（物質量子計測研究部門）が理論・計算分子科学研究領域からの併任として就任した。南谷准教授は2022年9月に大阪大学に転出した。2021年4月からは、熊谷 崇准教授が広帯域相関計測解析研究部門に専任で就任した。2025年度末での岡本センター長の退職、その後のセンター活動の継続を見据え、専任教授の公募を開始した。2025年度中の新任教授の着任と、センター長業務の後任者への引き継ぎを目指している。

以上のような方針で分子システムの計測解析に関する研究を遂行すること、及びそれを通じて我が国の関連研究コミュニティにおける人材育成に寄与することが本センターの主なミッションであるが、同時にここで開発された新しいメゾスコピック計測手法を共同研究に供することも重要な機能の一つである。各研究グループの協力研究やその他のチャネルの共同研究を通じてそれを実施するほか、適宜醸成された計測手法・技術に関するセミナー等を開催する。また、さらに新たな革新的計測手法の開拓を念頭に置いた、萌芽的研究テーマとアイデアの発掘、可能性及び将来構想を議論する研究会等の開催も行っている。旧分子制御レーザー開発研究センターでは、分子科学研究所と理化学研究所の連携融合事業「エクストリーム・フォトニクス」を推進する母体となり、その主な研究活動終了後も、合同シンポジウム等の活動を自主的に継続してきたが、本センターはこの活動の継続のための推進母体ともなることが想定されている。なお、旧分子制御レーザー開発研究センターは、発足当初、種々の共用機器を保有して施設利用に供していたが、現在ではそれらの機器とその利用は全て機器センターに移っており、それを受けて本センターでは施設利用は想定していない。

織細計測研究部門

岡本 裕巳（教授）（2000 年 11 月 1 日着任）

山西 絢介（特任助教）

AHN, Hyo-Yong（特任助教（共創戦略統括本部））

CHENG, An-Chieh（特任助教）

石川 晶子（技術支援員）

伊藤 敦子（事務支援員）

A-1) 専門領域：ナノ光物理化学

A-2) 研究課題：

- a) キラルナノ・マイクロ物質における局所的なキラル光学効果とその応用
- b) 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) 光学活性分光手法と顕微イメージングを組み合わせた新手法を開発し、それらを用いたナノ・マイクロ物質の局所光学活性に関する基礎研究、及び応用研究を推進している。ナノレベルの空間分解能での測定が可能な近接場光学顕微鏡による光学活性イメージングでは、主にキラルな構造を持つ金ナノ構造体を対象とし、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、高い対称性を持つアキラルな金属ナノ構造においても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を得た。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国際的にも未開拓であるが、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実験手法を開発し、微結晶試料、生体組織等への応用を、共同研究を通じて推進している。キラルな構造を持つ金属有機構造体（MOF）微結晶の掌性同定に成功し、多数の微結晶でそれぞれの掌性同定に有効であることを示した。液晶分子集合体をテンプレートとした螺旋状金微粒子集合体では、螺旋の掌性による円二色性信号の差を検出することに成功した。所内の共同研究で、有機スピントロニクス物質のキラル結晶の掌性同定にも有効に活用された。この他にも主として所外の研究者と共同で、様々なキラルナノ物質の観察・同定に用いる研究を推進し、また円二色性イメージングの医療応用を想定した基礎研究も、医科学分野の研究者と共同で行った。更に感度や測定速度を向上させる試み、波長範囲を拡張する試み等を推進している。また、それらの基盤的情報に基づき、キラル金属ナノ構造を用いて円偏光発光が高い偏光度で得られることを示した。円偏光によるキラル構造物質の創出に関する研究展開も進め、キラルでない系に円偏光を作用させることでユニークなキラルらせん構造が創出できることを、実験的に示した。
- b) 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）。非線形効果、共鳴効果、偏光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。この研究展開を図ることを、現在の研究活動の今一つの柱とした。キラルな物質においては、左右円偏光に対する力学的な作用が異なることが期待され、我々はキラル金ナノ微粒子の円偏光による光トラッピングを行いその挙動を調べた。その結果、光トラッピングに関する従来知られている機構では説明困難な部分が見いだされ、理論的に解

積した。これにより、キラル物質の光マニピュレーションの基礎となる知見を得た。また現在、このような光の力学作用を利用した、原子間力顕微鏡の原理に基づく顕微イメージング法（光誘起力顕微鏡）でナノ構造上のキラルな光場を可視化する手法の開発も行い、キラル金属ナノ構造においてナノスケールのキラル光学効果イメージングに成功した。

B-1) 学術論文

H.-Y. AHN, K. Q. LE, T. NARUSHIMA, J. YAMANISHI, R. M. KIM, K. T. NAM and H. OKAMOTO, “Highly Chiral Light Emission Using Plasmonic Helicoid Nanoparticles,” *Adv. Opt. Mater.* **12(22)**, 2400699 (2024). DOI: 10.1002/adom.202400699

H.-Y. AHN, T. NARUSHIMA and H. OKAMOTO, “Creation of a Photopolymerized Double Spiral Structure by Interference of Plasmonic Scattering and Circularly Polarized Light,” *J. Phys. Chem. C* **128(17)**, 7159–7168 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c08473

B-3) 総説、著書

橋谷田 俊, 岡本裕巳, 「キラル光学応答」, *固体物理*, **59(11)**, 643–658 (2024).

山西絢介, **AHN, Hyo-Yong**, 岡本裕巳, 「光誘起力顕微鏡によるキラル光学効果のナノ顕微観測」, *表面と真空*, **67(10)**, 478–482 (2024). DOI: 10.1380/vss.67.478

岡本裕巳, 「プラズモン共鳴のキラル光学効果」, *光学*, **53(7)**, 285–291 (2024).

B-4) 招待講演

山西絢介, 「光誘起力顕微鏡法の開発とキラル光学効果のナノ顕微観測」, 2025 年日本物理学会春季大会, オンライン開催, 2025 年 3 月.

岡本裕巳, 「キラル光学効果と顕微イメージング」, 分子研研究会「キラリティが関連する動的現象」, 岡崎, 2025 年 3 月.

山西絢介, **H.-Y. AHN**, 岡本裕巳, 「エナンチオ選択的光圧のナノ顕微観測」, 第 71 回応用物理学会春季学術講演会, 新潟, 2024 年 09 月.

H. OKAMOTO, “Imaging Chiral Optical Fields in Nano/Micro-Structured Materials,” Conference on Research and Innovations in Science and Technology of Materials, SNAIA – CRISTMAS 2024, Paris (France), December 2024.

J. YAMANISHI, “Optical Force Nanoscopy of Chiro-Optical Effect,” ISSP International Workshop, Materials Science of Solids and Surfaces using Radiation Field Controlled in Time/Space Domain, Kashiwa (Japan), October 2024.

H. OKAMOTO, “Optical Chiral Field Imaging of Nano/Micro-Structured Materials,” 32nd International Materials Research Congress, IMRC2024, Cancun (Mexico), August 2024.

H. OKAMOTO, H.-Y. AHN and T. NARUSHIMA, “Asymmetric electric fields induced on symmetric structure that yield chiral structured materials,” The 14th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics, META2024 Toyama, Toyama (Japan), July 2024.

H. OKAMOTO, “Imaging with Local Chiro-Optical Effects and Chiral Light-Matter Interaction,” Department seminar, Politecnico di Milano, Milan (Italy), June 2024.

H. OKAMOTO and J. YAMANISHI, “Imaging chirality of optical fields near nano-/micro-structured materials,” The 10th International Conference on Antennas and Electromagnetic Systems, AES2024 Rome, Rome (Italy), June 2024.

B-5) 特許出願

US2024142370(A1), “Circularly Polarized Light Illuminator, Analysis Device, and Microscope,” H. OKAMOTO and T. NARUSHIMA (National Institutes of Natural Sciences), 2022 年.

40106088, “Circularly Polarized Light Illuminator, Analysis Device, and Microscope,” H. OKAMOTO and T. NARUSHIMA (National Institutes of Natural Sciences), 2022 年.

B-6) 受賞, 表彰

山西絢介, 応用物理学会 講演奨励賞 (2024).

山西絢介, 名古屋大学石田賞 (2025).

AHN Hyo-Yong, プラズモニク化学研究会最優秀若手講演賞 (2025).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

プラズモニク化学研究会副会長 (2020–).

学会の組織委員等

14th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META2024), Organizing Committee (2023–2024).

34th International Symposium on Chirality, Local Organizing Committee (2024).

33rd International Materials Research Congress (IMRC2025), symposium organizer (2025).

Pacificchem 2025 symposium, organizer (2025).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術会議会員 (2020–2026), 化学委員会委員長 (2023–2026).

東京大学アト秒レーザー科学研究機構 連携協議会「ユーザー設備開発・利用研究」分科会委員 (2024–2025).

その他

学術変革領域研究(A)「光の螺旋性が拓くキラル物質科学の変革」事務局 (2022–2027).

B-8) 大学等での講義, 客員

早稲田大学理工学術院, 客員教授, 「先端ナノ光物理化学特論」, 2024 年 4 月–2025 年 3 月.

総合研究大学院大学先端学術院, オムニバス講義のコマ担当, 「機能物性科学」, 2024 年 4 月–9 月.

総合研究大学院大学先端学術院, 「構造光科学」, 2024 年 4 月–9 月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「高精度円偏光二色性イメージングによるキラリティ時空間構造の可視化」, 岡本裕巳 (2021年度–2024年度).

科研費学術変革領域研究(A),「超螺旋光とナノレベル物質のキラルな動的相互作用」, 岡本裕巳 (2022年度–2026年度).

科研費基盤研究(B),「シングル nm スケールでの物質の円偏光応答の解明」, 山西絢介 (2022年度–2025年度).

科研費学術変革領域研究(A) (総括班),「光の螺旋性が拓くキラル物質科学の変革」(代表: 尾松 孝茂), 岡本裕巳 (研究分担者) (2022年度–2026年度).

C) 研究活動の課題と展望

着任以来, 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を開発し, 試料の測定を行ってきた。その中で近接場光学活性イメージング法を開発して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解析に使い, そこからグループの主要な研究内容をキラル物質の局所光学活性のイメージングにシフトした。金属ナノ構造の近接場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, プラズモン由来の強くねじれた局所光場の存在, また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。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, 高い円偏光度を示す発光物質系を見出しその起源を解明するなど, 成果が得られた。通常の(遠方場)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。これらの近接場及び遠方場円二色性イメージングは, 今後様々なナノ・マイクロ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おり, 国内外との共同研究を数件行っている。円二色性顕微鏡を更に汎用性の高い装置とする開発を継続する。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共同研究も行った。更に, 円二色性イメージングの医療応用に関する共同研究も行った。微粒子の光による力学的マニピュレーションについても, キラル微粒子の光トラッピングに関する新たな成果が得られ, その展開も進めた。これらを総合した新たな方向への展開として, キラルな光-物質相互作用による, 物質キラリティの創出の試みを進める科研費学術変革領域研究(A)が採択されており, 残り少ない在任期間中, これに貢献していきたい。

広帯域相関計測解析研究部門

熊谷 崇（准教授）（2021 年 4 月 1 日着任）

西田 純（助教）

WANG, Yu（特任研究員）

伊藤 敦子（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，走査プローブ顕微鏡，近接場分光，単一分子科学，超高速ダイナミクス

A-2) 研究課題：探針増強近接場分光を基軸としたナノ物質科学の研究

- a) 超高真空・低温探針増強近接場分光による原子スケールの光と物質の相互作用の解明
- b) 超短パルスレーザーと探針増強近接場分光を融合したナノスケールコヒーレント分光の開発と応用
- c) 超高速探針増強顕微分光に基づく多次元・多変量ナノ顕微分光の開発と低次元ナノ物質への応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) プラズモニックナノ接合では，局在表面プラズモン共鳴の励起を介して強く局在化した光電場を発生させることができる。この強く局在化した光電場の性質と，それによって引き起こされる光物理・光化学現象について超高真空・低温探針増強顕微分光によって調べている。最近の重要な成果として，金属単結晶表面に吸着した単一原子のラマン散乱の計測を行い，原子スケールにまで閉じ込められた光電場の存在を証明し，原子スケールの光と物質の相互作用について新しい知見を与える研究を報告している [*ACS Nano* **17**, 10172 (2023)]。
- b) 超高真空・低温走査トンネル顕微鏡のプラズモニックナノ接合に発生する強く局在化した光電場を操る技術と，超短パルスレーザーとを組み合わせるアプローチによって時空間極限におけるナノスケールコヒーレント分光の開発を行っている。最近の重要な成果として，金属単結晶表面上にエピタキシャル成長させた酸化亜鉛超薄膜においてコヒーレントフォノンをナノスケールで直接観測することに成功している [*Science Advances* **8**, eabq5682 (2022)]。
- c) 原子間力顕微鏡に基づく非開口型近接場光顕微分光と，超短パルスレーザーとを組み合わせたナノスケール非線形分光の開発を行っている。この新しい先端計測技術によって，次世代の機能性材料やデバイスの基盤となるナノ物質科学の分野へと展開している。最近の成果として，原子層物質における光誘起ダイナミクスをナノスケールで直接観察し，その微視的機構を解明した研究を報告している [*ACS Photonics* **12**, 207 (2025)]。

B-1) 学術論文

H. WIEDENHAUPT, F. SCHULZ, L. E. PARRA LÓPEZ, A. HAMMUD, Y. PARK, A. SHIOTARI, T. KUMAGAI, M. WOLF and M. MÜLLER, “Plasmonic Light Emission by Inelastic Charge Transport in Ultrathin Zinc Oxide/Metal Heterostructures,” *Nano Lett.* **25**(7), 2870–2877 (2025). DOI: 10.1021/acs.nanolett.4c06099

Y. WANG, J. NISHIDA, K. NAKAMOTO, X. YANG, Y. SAKUMA, W. ZHANG, T. ENDO, Y. MIYATA and T. KUMAGAI, “Ultrafast Nano-Imaging of Spatially Modulated Many-Body Dynamics in CVD-Grown Monolayer WS₂,” *ACS Photonics* **12**(1), 207–218 (2025). DOI: 10.1021/acsp Photonics.4c01545

- C. LIN, J. LI, G. LI, W. LUO, S. LIU, A. HAMMUD, Y. XIA, A. PAN, M. WOLF, M. MÜLLER and T. KUMAGAI**, “Quantitative Comparison of Local Field Enhancement from Tip-Apex and Plasmonic Nanofocusing Excitation via Plasmon-Assisted Field Emission Resonances,” *Nanoscale* **17**, 7164 (2025). DOI: 10.1039/D4NR04262J
- Y. PARK, I. HAMADA, A. HAMMUD, T. KUMAGAI, M. WOLF and A. SHIOTARI**, “Atomic-Precision Control of Plasmon-Induced Single-Molecule Switching in a Metal–Semiconductor Nanojunction,” *Nat. Commun.* **15**(1), 6709 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-51000-w
- B. CIRERA, S. LIU, Y. PARK, I. HAMADA, M. WOLF, A. SHIOTARI and T. KUMAGAI**, “Single-Molecule Tip-Enhanced Raman Spectroscopy of C₆₀ on the Si(111)-(7×7) Surface,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26**(32), 21325–21331 (2024). DOI: 10.1039/d4cp01803f

B-4) 招待講演

- 熊谷 崇, 「Nanomaterial Characterization Using Infrared Nano-Spectroscopy」, 分子科学研究所研究会「電子強誘電体の新機能と新展開」, 岡崎, 2025年1月.
- 熊谷 崇, 「Single-Molecule Raman Spectroscopy in Plasmonic “Picocavity”」, 一分子の科学, 静岡, 2024年10月.
- T. KUMAGAI**, “Visualizing local exciton formation and many-body dynamics in single-walled carbon nanotubes,” The 67th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium, 高知, 2024年9月.
- 熊谷 崇, 「Nano- & Atomic-Scale Spectroscopy Using Tip-Enhanced Near-Field Optics」, ナノ赤外分光の新展開ワークショップ, 兵庫県佐用町, 2024年7月.
- T. KUMAGAI**, “Ultrafast Nano-Spectroscopy of Photo-Induced Dynamics in Low-Dimensional Materials,” DPG Spring Meetings 2025, Regensburg (Germany), March 2025.
- T. KUMAGAI**, “Tip-Enhanced Vibrational Spectroscopy for Single Atoms & Molecules,” Sino-German Workshop on Surface Science of Complex Systems, Changchun (China), January 2025.
- T. KUMAGAI**, “Nanomaterial Characterization Using Infrared Nano-Spectroscopy,” FHI-ICAT Joint Symposium 2024, Berlin (Germany), November 2024.
- T. KUMAGAI**, “Nanomaterial Characterization Using Infrared Nano-Spectroscopy,” ISSP International Workshop, “Materials Science of Solids and Surfaces using Radiation Field Controlled in Time/Space Domain,” Tokyo (Japan), October 2024.
- T. KUMAGAI**, “Tip-Enhanced Raman Spectroscopy in STM picocavities,” Light-Matter Interaction at Nanoscale 2024, Madrid (Spain), September 2024.
- J. NISHIDA**, “Local Carrier and Exciton Dynamics in Low-Dimensional Semiconductors Probed by Ultrafast Mid-Infrared Nanoscopy,” International Symposium on the Physics of Semiconductors and Applications (ISPSA 2024), Jeju (Korea), June 2024.
- T. KUMAGAI**, “Nano-Spectroscopy for Single Atoms, Molecules, Nanomaterials,” Seminar at University of Malaya, hosted by Prof. Raymond Ooi, Kuala Lumpur (Malaysia), February 2025.
- T. KUMAGAI**, “Nano-Spectroscopy for Single Atoms, Molecules, Nanomaterials,” Seminar at Shinshu University, hosted by Prof. Katsumi Kaneko, Nagano (Japan), February 2025.
- T. KUMAGAI**, “Nano-Spectroscopy for Single Atoms, Molecules, Nanomaterials,” Seminar at Osaka University, hosted by Prof. Masayuki Abe, Osaka (Japan), October 2024.

T. KUMAGAI, “Nano-Spectroscopy for Single Atoms, Molecules, Nanomaterials,” Seminar at CSIC ICM, hosted by Dr. Borja Cirera, Madrid (Spain), September 2024.

T. KUMAGAI, “Nano- & Atomic-Scale Spectroscopy Using Tip-Enhanced Near-Field Optical Microscopy,” Seminar at Yokohama National University, hosted by Prof. Ikufumi Katayama, Kanagawa (Japan), June 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会中部支部幹事 (2022–).

学会の組織委員等

NanospecFY2023 (2024/3/4–5, 愛知) “Frontier of Nano- & Atomic-Scale Characterization,” Organizer (Chair) (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

北海道大学, 客員准教授, 2020年4月–.

北海道大学触媒科学研究所, 招へい教員, 2024年4月–2025年3月.

大阪大学大学院基礎工学研究科, 招へい教員, 2024年4月–2025年3月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構創発的研究支援事業 (受託研究), 「時空間極限における革新的光科学の創出」, 熊谷 崇 (2021年度–2027年度).

科研費学術変革領域研究 (A), 「超高速・超広帯域近接場顕微分光で拓く 2.5 次元物質の光科学」, 熊谷 崇 (2024年度–2025年度).

科研費基盤研究 (B), 「キャリア・励起子輸送の実時空間観測とナノスケール制御」, 西田 純 (2024年度–2026年度).

科学技術振興機構創発的研究支援事業, 「極低温フォノンポラリトニクスによる固体物性制御」, 西田 純 (2024年度–2027年度).

大幸財団自然科学系研究助成, 「単一分子振動コヒーレンスの赤外観測と非線形制御」, 西田 純 (2024年度–2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

概要としては, 探針増強近接場分光の先端計測を研究室の柱としてナノ物質科学の新しい学際領域の形成, 革新的な光科学・光技術の創出を目指した基礎研究を展開する。超高真空・低温探針増強顕微分光の技術開発についてはほぼ完了し, 超高感度・超高分解能の顕微分光の原理についても理解が深まっている。今後はこの先端計測を応用し, 不均一触媒や光電デバイスなどの物質機能の根幹に関わる表面の局所的な構造や反応, またそれらの動態についての研究へと展開していく。現在は, これまで探針増強分光があまり応用されていなかった半導体・酸化物表面の計測を進めている。原子間力顕微鏡に基づく超高速探針増強近接場分光については, 現在も技術開発要素が残されているが, ナノ物質の計測へと応用を進めることができおり, 現在はナノカーボン, 原子層物質, 有機–無機ハイブリッドペロブスカイト, 生体分子などの研究を進めている。今後は多次元・多変量ナノ顕微分光のコンセプトに基づき, ナノ物質の物性・機能について物理化学的な理解を得ることを目的とした研究を展開する。国際的な研究活動として, 2021年に研究協力協定を締結したフリッツ・ハーバー研究所 (ベルリン, ドイツ) との共同研究や学術交流についても積極的に推進していきたいと考えている。

4-3 協奏分子システム研究センター

4-3-1 経緯と現状、将来構想

協奏分子システム研究センターは 2013 年 4 月に発足し、分子科学研究所がこれまでに培ってきたナノサイエンスに関する研究資産を基盤に、新しい分子科学の開拓に取り組んでいる。センターのミッションは、「分子それぞれの性質が階層構造を持つ分子システムの卓越した機能発現にどう結びつくのか」という分野横断的な重要課題を解決することである。そのためには、システムの構成要素である分子自身について理解を深めるのに加え、それぞれの分子がどのようなネットワークや制御を介して混然一体となり、複雑かつ高度な機能の発現へと繋がっていくのかを理解しなければならない。

このような目的の達成に向けて、微細なナノスケールの分子科学からタンパク質や細胞のようなマクロで不均一な分子科学まで研究者を幅広く募り、「階層分子システム解析研究部門」、「機能分子システム創成研究部門」、「生体分子システム研究部門」の 3 部門体制で研究活動を展開している。現在、専任 PI が 3 名（秋山教授、山本教授、倉持准教授）、併任 PI が 4 名（斉藤教授、青野教授、加藤教授、飯野教授）の計 7 名となっている。未踏の領域に切り込む若手研究者から、分野をリードするシニア研究者まで、異なる学問領域の研究者が集うメンバー構成となっている。

2024 年度の特筆すべき研究成果として、ラパマイシンによる FRB-FKBP 融合タンパク質のオリゴマー化に関する共同研究（秋山グループ）が科学雑誌「*FEBS Letters*」誌に掲載された。その他、階層分子システム解析研究部門からは、励起状態の分子が芳香族性を獲得する過程を直接観察した成果が「*Journal of the American Chemical Society*」誌に（倉持グループ）発表され、その学術的な新規性・重要性が高く評価されている。

専任 PI はセンターが掲げる目標に向かって、これまでの研究とは違う新しい一歩を踏み出すことが求められる。既に一部のグループ間で共同研究が進行中であるが、より多くのセンター構成員で共有できる新しい研究プロジェクトを練り上げていく必要がある。専門から少し離れた分野でのプロジェクト立案には人的交流が何よりも重要であるため、研究グループの居室を南実験棟の 3 階の 1 フロアに集中させ、一部をオープンスペースとして運用しつつ、科学的な議論や交流を活発に進めている。

その他、CIMoS セミナー、ワークショップなどを企画・実施し、それらを通じてセンターの活動や成果を国内外のコミュニティに向けて発信している。

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）

古池 美彦（助教）

堀内 滉太（助教）

尾上 靖宏（特任研究員）

NACER, Lamia（インターンシップ）

CHAWAPUN, Pornthip（インターンシップ）

近藤 貫太（大学院生）

鷺尾 みどり（技術支援員）

大原 さとみ（技術支援員）

山本 優里桂（技術支援員）

岡田 亜樹（技術支援員）

谷浦 愛子（技術支援員（派遣））

蜂須賀 円（技術支援員（派遣））

鈴木 博子（事務支援員）

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) シアノバクテリアをモデル系とした概日時計研究に取り組み、独自性の高い数々の研究（Mukaiyama *et al.* *BioRxiv* 2024; Furuike *et al.* *BioRxiv* 2024; Furuike *et al.*, *Sci. Adv.* 2022; Furuike *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2022; Furuike *et al.*, *Commun. Phys.* 2022; Ito-miwa *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2020; Abe *et al.*, *Science* 2015）や国際基調講演（SRBR 2022; 5th Asian Forum on Chronobiology 2021; ELSI Symposium 2020; V-WCC 2019）をとおして、「概日時計システムの周波数特性が、ごく限られた種類の構成因子にエンコードされている」という新概念を提示した（長瀬研究振興賞 2022；日本学術振興会賞 2016；文部科学大臣表彰若手科学者賞 2008；日本生物物理学会若手奨励賞 2007；2006 SAS Young Scientist Prize from IUCr）。直近では、基盤研究 (S) [2017～2021 年度], 基盤研究 (S) [2022～2026 年度], 学術変革領域 (A) 計画研究 [2024～2028 年度] 等のプロジェクトで代表者を務め、国内外の研究コミュニティの拡大に尽力するとともに、以下に詳述する波及効果の高い成果（5 件）を輩出してきた。

一つ目は、KaiC が自律的振動子として分子進化した仮説の提唱である（Mukaiyama *et al.*, *BioRxiv* 2024）。明暗サイクルは独立栄養生物の一種であるシアノバクテリアの光合成効率に影響を与える。よって、酸素発生型光合成系が確立した太古のシアノバクテリアが自律的な概日時計を保持していたかどうかを明らかにすることは、時間生物学における重要な課題である。現生型および祖先型 KaiC の機能と構造を調べ、自律的な Kai タンパク質振動子の進化の起源を明らかにした。

二つ目は、KaiC の第一自己リン酸化過程の解明である (Furuike *et al.*, *BioRxiv* 2024)。自己キナーゼ活性を有する KaiC において、T432 で起こる最初のリン酸化 (第一リン酸化) は、それに続いて起こる S431 のリン酸化 (第二リン酸化) を促進する重要なステップである。KaiC の自己リン酸化には KaiA が必須であると考えられているが、第一リン酸化の活性化と不活性化のメカニズムは依然として不明であった。我々は、KaiA 非存在下でも第一リン酸化は進行するが、その反応速度が 0.019 h^{-1} のレベルまで著しく自己抑制されていることを見いだした。構造解析や QM/MM シミュレーションを実施することにより、KaiC の自己阻害と KaiA による自己阻害解除のメカニズムを解明した。

三つ目は、KaiC に隠されたアロステリック制御の解明である (Furuike *et al.*, *Biophys. Physicobiol.* 2024; Furuike *et al.*, *Sci. Adv.* 2022; Furuike *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2022)。複雑多様なアロステリック制御は細胞機能に振動現象をもたらす非線形性の源であるため、時計タンパク質のアロステリック構造転移を解明するための努力が続けられてきた。しかし、これまでに報告されている KaiC の全構造は、リン酸化修飾の有無に依らず構造が同一であり、概日リズムを駆動するアロステリーについては理解が進んでいなかった。我々は、S431 と T432 のリン酸化修飾サイクルを網羅する 4 つの異なる状態の KaiC を結晶化し、検出された複雑多様なアロステリーを詳細に分析することで、KaiC の振動性に必須となる最小単位のアロステリーを特定した。これらの成果を複数の総説 (Furuike *et al.*, *SPRING-8/SACLA Research Frontiers* 2023; 古池美彦, *日本結晶学会誌* 2023; 古池美彦, *生物物理* 2023; 古池美彦, *SPRING-8/SACLA 利用者情報* 2022) として取りまとめた。複数の学協会 (日本結晶学会, 日本生物物理, SPRING-8 ユーザー協団体) から、研究グループ所属の助教 (古池美彦) に若手を対象とした賞が贈られている。

四つ目は、KaiC の温度補償性に関する成果である (Furuike *et al.*, *Commun. Phys.* 2022)。時計タンパク質は、酵素活性を生理的な温度範囲で一定に保つ温度補償能を有する。他方、酵素を構成するアミノ酸は高温でより頻繁に揺らぎ、それに伴って酵素活性が上昇する傾向が一般的にみられる。よって、温度補償能を有する概日時計タンパク質のダイナミクスが特殊な制御を受けている可能性があるが、それを実験的に証明した例は皆無である。我々は、温度補償型 ATPase である KaiC のダイナミクスに及ぼす温度の影響を中性子準弾性散乱法で精査した。その結果、KaiC が揺らぎを利用しつつ、高温下で C1-ATPase 活性が上昇しないように自律制御していることが明らかとなった。酵素が自らの活性を高めるためだけでなく、恒常性を実現する自律的手段として揺らぎを積極的に利用していることを示す独自性の高い研究成果である。

五つ目は、概日時計の絶対的な遅さの起源解明である (Furuike *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2022; Simon *et al.*, *Biophys. Physicobiol.* 2022; Abe *et al.*, *Science* 2015)。概日時計は、ゆっくりとした秩序ある細胞ダイナミクスを生み出す、高速で動く生体高分子で構成されているため、全体としての遅さの原因は不明であった。我々は、周期を規定する C1-ATPase の遅さが、加水分解に用いられる水分子の隔離や、高い活性化エネルギーを有するペプチド異性化に起因していることを解明した。本成果は国内外の化学誌 (*ChemistryWorld* June 2015, *現代化学* 2015)、専門家評価コメント (<http://smc-japan.org/?p=4072>)、国内の新聞記事 (毎日新聞, 日本経済新聞) 等で取り上げられ、学術的な新規性が世界的に高く評価されている。

- 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 (Inobe *et al.*, *FEBS Lett.* 2024)。

B-4) 招待講演

秋山修志,「Past & Future of the Circadian Clock System in Cyanobacteria」, 学術動向調査の会, 熱海, 2025年3月.

秋山修志,「Past & Future of the Circadian Clock System in Cyanobacteria」, 第3回タンパク質シンポジウム, 東京大学鉄門記念講堂, 東京, 2025年1月.

秋山修志,「KaiCの反応・動態・構造から探る概日時計制御機構」, 第二回領域会議, 高槻, 2025年1月.

古池美彦, 森 俊文, 秋山修志,「Molecular Mechanism of KaiC Autophosphorylation」, 第31回時間生物学会学術大会, 富山国際会議場, 富山, 2024年11月.

秋山修志, 古池美彦, 森 俊文,「Mechanism of KaiC Autophosphorylation」, 第97回日本生化学会大会, パシフィコ横浜, 横浜, 2024年11月.

秋山修志,「KaiCの反応・動態・構造から探る 概日時計制御機構」, キックオフシンポジウム・公募説明会, 東京大学, 東京, 2024年7月.

S. AKIYAMA, “Past & Future of the Circadian Clock System in Cyanobacteria,” IPR International Conference 2025, Awaji Island, Awaji (Japan), January 2025.

S. AKIYAMA, “Evolution of Cross-scale Causality in the Cyanobacterial Circadian Clock System,” SAS2024, Taipei (Taiwan), November 2024.

S. AKIYAMA, “Autonomous Disassembly of Circadian Clock System of Cyanobacteria at Dawn,” Sapporo Symposium on Biological Rhythm 2024, Sapporo (Japan), August 2024.

S. AKIYAMA, “Cross-Scale Causality in the Cyanobacterial Circadian Clock System,” International Chronobiology Summer School 2024, Nagoya (Japan), August 2024.

S. AKIYAMA, “Past & Future of the Circadian Clock System in Cyanobacteria,” SRBR 2024 Biennial Conference, San Juan (Puerto Rico), May 2024.

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 (2023–2025).

学会の組織委員等

名古屋大学大学院理学研究科 学会組織委員 (2025).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術会議連携会員 (2020–2024).

SPring-8長期利用分科会委員 (2019–).

日本学術振興会学術システム研究センター研究員 (2023–2026).

学会誌編集委員

Biophysics and Physicobiology, Editorial Board Members (2022–2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

琉球大学, 非常勤講師, 2025年1月–3月.

琉球大学, 客員教授(客員研究員), 2025年1月–3月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(S),「概日時計の複雑多様性の単純化」(代表:秋山修志),古池美彦(研究分担者)(2022年度-2026年度).

科研費学術変革領域研究(A),「時間タンパク質学:KaiCの反応・動態・構造から探る概日時間制御機構」,秋山修志(2024年度-2028年度).

日本学術振興会学術動向等に関する調査研究(受託研究),「生物物理学関連分野に関する学術研究動向」,秋山修志(2023年度-2024年度).

武田科学振興財団 2022年度生命科学研究助成,「概日時計タンパク質 KaiC における構造多型の操作と解析」,秋山修志(2022年度-2026年度).

(公財)豊秋奨学会 2023年度研究費助成,「月面環境サイクルに適合した概月時計の設計」,秋山修志(2023年度-2025年度).

科研費若手研究,「時計タンパク質の絡み合ったアロステリック運動を読み解く」,古池美彦(2022年度-2024年度).

科研費学術変革領域研究(A),「時間タンパク質学領域の総括」(代表者:吉種 光),秋山修志(研究分担者)(2024年度-2028年度).

科研費基盤研究(B),「Kai システムの自律振動過程で生じる KaiC-KaiA/KaiB 結合モードの時間依存的変調」(代表者:上久保裕生),秋山修志(研究分担者)(2023年度-2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

2017年度から取り組んできた基盤研究(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:2017~2021年度]が終了し,Kai タンパク質時計の普遍性と多様性の解明,ATPase/リン酸化構造基盤の解明,温度補償性と揺らぎの関係性の解明,いずれにおいても当初の目標を上回る新発見があった(最終年度検証結果:A)。2023年度に開始した基盤研究(S)[概日時計の複雑多様性の単純化:2022~2026年度]については,2024年度に「A(順調に研究が進展しており,期待どおりの成果が見込まれる)」との中間評価を頂いた。2023年度に開始した基盤研究(S),そして2024年に採択された学術変革領域(A)の計画研究(代表),いずれの課題についても波及効果の大きい論文として公表できるよう,今の質を堅持しつつも更にペースを上げて研究を進める。

倉持 光（准教授）（2020 年 4 月 1 日～2025 年 3 月 31 日）＊）

米田 勇祐（助教）

古賀 雅史（特任助教）

落合 奎介（大学院生）

神谷 美穂（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，超高速分光，非線形分光，超短パルス発生

A-2) 研究課題：

- a) 新規超高速非線形分光法の開発と応用
- b) 単一分子レベルでの新規分光法の開発と応用
- c) 先端的超高速分光による凝縮相複雑分子の電子・構造ダイナミクスの研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 室温・溶液中にあるタンパク質などの巨大分子における遅い構造揺らぎに伴う励起エネルギー揺らぎの観測を目的として、新たに蛍光励起相関分光法（Fluorescence excitation correlation spectroscopy: FECS）を開発した。この手法では、広帯域の極短パルスを対にして励起光とし、二つのパルス間の遅延時間を掃引しながら、単一分子レベルで蛍光を検出し、蛍光相関分光を行う。パルス間の遅延時間の関数として得られる規格化されていない蛍光自己相関関数をフーリエ解析することで、励起エネルギー分解された自己相関関数が得られることを、典型色素溶液を対象として実証した。このデータからは、マイクロ秒～ミリ秒スケールで励起周波数が自発的にどのように変化するか、すなわち光反応などではない熱反応や平衡過程などの非同期過程によってどのように変化するかを明らかにすることが可能であり、タンパク質などの自発的な構造揺らぎに伴う励起エネルギー揺らぎの観測と解明に応用できる可能性を示している。
- b) 我々が最近開発した蛍光励起相関分光法（FECS）は励起エネルギーの自発的な揺らぎを観測することができる強力な手法であるが、得られる情報は自己相関関数に限られている。複雑系で平衡状態にあるサブアンサンブル間のスペクトル交換を観測・解明するには、相互相関の取得が重要となる。そこで、我々は FECS をさらに発展させることで、マイクロ～ミリ秒スケールにおける異なるスペクトル間の相互相関を明らかにする 2 次元蛍光励起相関分光法（2D-FECS）の開発を進めた。この方法は、速い励起エネルギー揺らぎやスペクトル拡散・交換を観測するために用いられるコヒーレント 2 次元電子分光法（2D-ES）とコンセプトを共有しつつも、2D-ES では観測が困難な、電子励起状態の寿命を超える時間スケールでのダイナミクスの観測が可能な強力な手法である。典型色素溶液や量子ドットを用いた原理検証実験に成功しており、今後光応答性タンパク質などへと応用展開するべく、更なる感度向上に取り組んでいる。
- c) 電子基底状態において芳香族性を持たない分子が電子励起状態において芳香族性を発現する「励起状態芳香族性」が近年、基礎・応用の両面で注目を集めている。特に、励起状態芳香族性の発現に伴う分子構造の変化を駆動力とする光機能性分子材料の開発が盛んに行われているが、この構造変形過程が実時間観測された例はない。我々は、所外研究者と共同し、励起状態芳香族性を示す典型分子 FLAP に対しフェムト秒時間分解ラマン分光を行い、フェムト～ピコ秒の時間スケールで起こる構造ダイナミクスの観測を行った。その結果、芳香族性の発現によって、数ピ

コ秒で分子が曲がった V 字形状から平面形状へと変化する構造ダイナミクスを実時間で捉えることに成功した。また、その過程において、振動モード間の共鳴 (Fermi resonance) が過渡的に起こるという興味深い現象も明らかにした。これらの結果は、励起状態芳香族性に基づく新規機能性分子材料の設計において、新たな構造学的指針を与えるものである。

B-1) 学術論文

H. WATANABE, M. IWAMURA, K. NOZAKI, T. TAKANASHI, H. KURAMOCHI and T. TAHARA, “Torsional Structural Relaxation Caused by Pt–Pt Bond Formation in the Photoexcited Dimer of Pt(II) N⁺C⁺N Complex in Solution,” *J. Phys. Chem. Lett.* **16**(1), 406–414 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.4c03170

K. SUGA, K. OCHIAI, Y. YONEDA, H. KURAMOCHI and S. SAITO, “An Energy-Tunable Dual Emission Mechanism of the Hybridized Local and Charge Transfer (HLCT) and the Excited State Conjugation Enhancement (ESCE),” *Chem. –Eur. J.* **31**(18), e202404376 (2024). DOI: 10.1002/chem.202404376

D. H. KANG, M. KOGA, N. HALDAR and D. M. NEUMARK, “Dynamics of Photoexcited 5-bromouracil and 5-Bromo-2'-deoxyuridine Studied by Extreme Ultraviolet Time-Resolved Photoelectron Spectroscopy in Liquid Flat Jets,” *Chem. Sci.* **15**(41), 17245–17255 (2024). DOI: 10.1039/D4SC03920C

Y. YONEDA and H. KURAMOCHI, “Room-Temperature Solution Fluorescence Excitation Correlation Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. Lett.* **15**(33), 8533–8539 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.4c01798

M. KOGA, D. H. KANG, Z. N. HEIM, P. MEYER, B. A. ERICKSON, N. HALDAR, N. BARADARAN, M. HAVENITH and D. M. NEUMARK, “Extreme Ultraviolet Time-Resolved Photoelectron Spectroscopy of Adenine, Adenosine and Adenosine Monophosphate in a Liquid Flat Jet,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26**(17), 13106–13117 (2024). DOI: 10.1039/D4CP00856A

B-4) 招待講演

倉持 光, 「数サイクルパルスを用いた複雑分子系の超高速コヒーレント振動分光」, レーザー学会学術講演会第 45 回年次大会, 広島, 2025 年 1 月.

倉持 光, 「数サイクルパルスを用いた複雑系の超高速コヒーレント振動分光」, 京都大学理学部化学教室セミナー, 京都, 2024 年 12 月.

倉持 光, 「数サイクルパルスで観る複雑分子系の超高速化学反応ダイナミクス」, 計算・分光・情報・合成が拓く分子設計の最前線, 筑波, 2024 年 11 月.

倉持 光, 「Unraveling ultrafast chemical reaction dynamics through vibrational coherence」, 令和 6 年度化学系学協会東北大会, 秋田, 2024 年 9 月.

倉持 光, 「数サイクルパルスを用いた超高速非線形分光で観る光化学反応のダイナミクス」, 2024 年光化学討論会, 福岡, 2024 年 9 月.

倉持 光, 「有機化学者のための超高速分光・非線形分光の基礎と最先端」, 第 55 回構造有機化学若手の会夏の学校, 大阪府池田市, 2024 年 7 月.

H. KURAMOCHI, “Unraveling chemical reaction dynamics with ultrafast time-domain vibrational spectroscopy using few-cycle pulses,” Department Seminar at Yonsei University, Seoul (Korea), February 2025.

H. KURAMOCHI, “Unraveling Ultrafast Chemical Reaction Dynamics of Condensed-Phase Complex Molecular Systems through Vibrational Coherence,” G-LAMP symposium, Cheongju (Korea), February 2025.

Y. YONEDA, “Chemical dynamics in condensed phases observed by ultrafast time-domain vibrational spectroscopy,” Asian Conference on Ultrafast Phenomena 2025, Taipei (Taiwan), January 2025.

Y. YONEDA, “Exploration of excited state dynamics using time-domain vibrational spectroscopy,” Oktoberfest of Chemical Physics, Okazaki, October 2024.

H. KURAMOCHI, “Tracking non-equilibrium excited-state dynamics with ultrafast time-domain vibrational spectroscopy,” 39th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Shizuoka, June 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会運営委員 (2024–2026).

学会の組織委員等

第 22 回時間分解振動分光学国際会議 運営委員 (2022–2025).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省研究振興局学術調査官 (2023–2025).

理科教育活動

講師「第 44 回数理の翼夏季セミナー」NPO 法人数理の翼 (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2022 年 5 月–2027 年 3 月.

京都大学大学院理学研究科, 非常勤講師, 「超高速分光・非線形分光の基礎から最先端まで」, 2024 年 10 月–2025 年 3 月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構創発的研究支援事業 (受託研究), 「室温・溶液中における単一分子の極限時間分解分光」, 倉持 光 (2021 年度–2027 年度).

科研費基盤研究 (A), 「単一分子超高速分光による動的生体光エネルギー変換機構の探究」 (代表者: 倉持 光), 米田 勇祐 (研究分担者) (2024 年度–2026 年度).

科研費基盤研究 (B), 「新規多次元振動分光による反応ポテンシャル特異点の探究」, 米田 勇祐 (2024 年度–2026 年度).

C) 研究活動の課題と展望

我々は先端的な超高速分光法を駆使し, 凝縮相複雑分子系の機能・構造・ダイナミクスの解明に取り組んでいる。特に, アンサンブル平均を観るバルク溶液・固体に対する先端的な超高速分光と, 室温・溶液中の単一分子レベルでの各種分光法を相補的に用いることで, 凝縮相複雑分子系の反応ダイナミクスの研究に新たな途を拓くことを目指している。最近, 我々は励起エネルギーの自発的揺らぎを観測する蛍光励起相関分光を開発したが, 今後は本手法をさらに発展させた 2 次元蛍光励起相関分光法の開発とその応用を推進する。これにより, 光合成系をはじめとする光応答性タンパク質におけるマイクロ～ミリ秒スケールでのサブアンサンブル間のスペクトル交換を可視化し,

これらタンパク質の光反応を駆動する発色団分子の電子状態が、遅い自発的構造揺らぎによってどのように制御されているのか観測・解明する。さらに、この手法をポンプ・プローブ法と融合させることで、反応ダイナミクス揺らぎの計測へと展開する。バルクな系に対する先端的な超高速分光においても、新奇光機能性分子や光合成タンパク質など、多様な系から有意な成果が得られつつあり、今後もその応用をさらに強力に推進していく。

＊) 2025 年 4 月 1 日大阪大学大学院基礎工学研究科教授

岡本 泰典（准教授）（2024 年 8 月 1 日着任）

江藤 智子（技術支援員）

野田 彩加（事務支援員）

A-1) 専門領域：生物無機化学，生体化学，錯体化学，タンパク質工学

A-2) 研究課題：生命分子システムの設計・制御をめざした生体分子工学

- a) 光駆動型人工金属酵素の開発と応用
- b) 人工多核金属酵素の開発
- c) 構造変化と触媒機能が連動する人工酵素の開発
- d) 生物由来ベシクルのエンジニアリング基盤の形成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

生命分子システムの設計・制御をめざした **designer biomolecule** の創出；連鎖的につながった生体内化学反応ネットワークによって細胞機能は制御されている。この生体内化学反応ネットワークを再設計して物質生産や医薬への応用をめざす研究が精力的に行われている。この生体内化学反応ネットワークに非天然化学反応を自在に統合できれば、天然の酵素反応だけではアクセスできない高付加価値化合物の生産や新たな作用機序の医薬の開発につながる。このような背景のもと、我々は非天然の物質変換能を付与した人工金属酵素を用いて生体内化学反応ネットワークに介入することをめざしている。

人工金属酵素とは、ホストとなるタンパク質の内部空間に非天然の合成金属錯体を導入する、あるいは非天然の金属中心をタンパク質のアミノ酸側鎖を用いて構築することで得られるものを指す。人工金属酵素研究では、酵素の持つ「温和な反応条件で高選択的な物質変換能」と、金属錯体の持つ「自然界に存在しない強力な化学変換能」の両方を兼ね備える触媒の開発を目指している。一方、我々は人工金属酵素の高い生体分子寛容性に注目してきた。生体分子寛容性とは、他の生体分子が存在する細胞内環境でも失活しないことを意味する。我々のグループでは、この人工金属酵素の特性を活かし、人工金属酵素による生体内化学反応ネットワークの再編成・制御をねらった次の4つのプロジェクトを並行して進めている。

- a) 光駆動型人工金属酵素の開発と応用；多くの人工金属酵素が開発されてきたが、触媒活性を外部刺激によって制御可能なものはほとんど報告されていない。我々は細胞や生体内での利用を念頭に光によって活性制御可能な人工金属酵素の開発に取り組んできた。以前に我々はタンパク質の内部空間に導入することでルテニウム錯体の光化学特性を変化させることに成功している。ここで得られる人工金属酵素は光照射によって活性化され、抗体のアミノ酸残基選択的な化学修飾反応を触媒する。現在、この光駆動型人工金属酵素の高機能化をめざし、他の金属錯体の検討を開始している。また、ホストタンパク質の変更および改変も検討しており、新たなホストタンパク質候補の探索や変異体作成に向けた基盤技術の開発に取り組んでいる。
- b) 人工多核金属酵素の開発；複数の金属イオンによって活性中心を構築する多核金属酵素は、合成化学的に困難な物質変換を低環境負荷型の反応条件で高選択的に進行させる。そのため、多核金属酵素を人工的に作り直すことで、強力な触媒開発の指針が得られる。しかし、タンパク質内部で複数の金属イオンを設計通り自在に配置することは極めて困難である。このような背景のもと、これまでに我々は独自の計算科学的設計手法を用いて、多核金属中心

の構築に挑んできた。これまでに、いくつかのタンパク質の内部で設計通りの多核金属中心が構築されていることを結晶構造解析によって確認することができた。さらに、そのうちのいくつかにおいて、興味深い特性が発現することを見出した。

- c) 構造変化と触媒機能が連動する人工酵素の開発；生命現象を制御する高次機能，例えばエネルギー変換やシグナル伝達は，複数のタンパク質や酵素で構成される「システム」によって実現されている。このようなシステムを構成するタンパク質の活性は，シグナル分子を介して連動している。そのようなシステムの構築を念頭に，本研究ではシグナル分子との結合によって誘起される構造変化と触媒活性が連動する人工酵素の開発を行っている。現在，シグナル分子との結合によって構造変化するタンパク質への触媒部位の設計に取り組んでいる。
- d) 生物由来ベシクルのエンジニアリング基盤の形成；人工金属酵素の細胞／個体内送達システムとして，我々は生物由来のベシクルに注目している。我々はベシクルに複数種類の機能性分子を搭載するための方法論を開拓している。現在までに，このベシクルの内部に任意のタンパク質を内包することに成功している。

B-3) 総説，著書

Z. LIU, Y. OKAMOTO and S. SATO, “Photocatalytic Structures for Protein Modifications,” *ChemCatChem* **16**(14), e202301424 (2024). DOI: 10.1002/cctc.202301424

岡本泰典, 「生物学的環境における合成金属触媒による非天然化学変換」, *生体の科学*, **75**(2), 170–175 (2024). DOI: 10.11477/mf.2425201841

B-4) 招待講演

Y. OKAMOTO, “Development of designer enzymes for concerted uses with biological molecules,” The 145th Annual Meeting of the Pharmaceutical Society of Japan, Fukuoka, March 2025.

Y. OKAMOTO, “Regulating the reactivity of a synthetic metal complex by a protein matrix for biochemical applications,” 2024 Frontier Bioorganization Forum, Taipei (Taiwan), September 2024.

Y. OKAMOTO, “Artificial enzyme for biochemical applications,” Korea-Japan Symposium on Molecular Science, Busan (Korea), June 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

錯体化学会副事務局長 (2024–).

理科教育活動

パネルディスカッション司会「研究者という仕事」東北大学 (小学生以上対象) (2024).

その他

生体分子の工学的研究のコミュニティ形成に向けたPodcastの収録・配信 (名称：分子デザインははじめました, URL: <https://t.co/aqYGgPTpK6>, 2024年3月31日配信開始, 2025年3月10日時点で14エピソード) (2024).

B-8) 大学での講義, 客員

東北大学国際学士コース, 全学教育科目展開科目講義「生命科学B」, 2021年4月–2024年7月.

東北大学学際科学フロンティア研究所, 非常勤講師 (客員准教授), 2024年12月–2025年3月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究 (受託研究), 「金属イオンのタンパク質内精密多点配置による機能創出」, 岡本泰典 (2022年度–2025年度).

(公財) 豊田理化学研究所 2024年度豊田理研スカラー研究助成金, 「多機能化バイオベシクルの開発」, 岡本泰典 (2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

上述のように我々のグループでは, 非天然の物質変換能を付与した人工金属酵素を用いて生体内化学反応ネットワークに介入することをめざしている。この目標の達成に必要なパーツとして, 上記の4つの研究を進めている。今後この4つを並行して進めていくが, 来年度は, この長期的目標に向けて興味深いデータの得られているb) 人工多核金属酵素の研究に力点を置く。

小杉 貴洋（助教）（2015 年 6 月 1 日着任）

鈴木 規子（技術支援員）

鈴木 博子（事務支援員）

A-1) 専門領域：生物物理学，理論化学，生体関連化学

A-2) 研究課題：

- a) 機能を持ったタンパク質をゼロから創り，その機能を理解する
- b) タンパク質複合体を改造し，その協奏的機能を理解・制御する
- c) 改造タンパク質複合体を用いて細胞機能を理解・制御する
- d) 蛍光タンパク質の設計原理の解明と新規創出

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) アデノシン 3 リン酸（ATP）は生体内でのエネルギー源やシグナル伝達物質として多様な役割を果たしている。この ATP に結合し加水分解するタンパク質を創ることは，ATP 結合・加水分解の分子機構解明，さらには生体内の様々な現象の理解と制御につながる。そこで，計算機を用いて，ATP を結合および加水分解するタンパク質を創り出すことを目指し研究を行っている。これまでに，設計したタンパク質が ATP 結合および加水分解活性を持ち，結晶構造解析により設計通りの構造であることを確認した。さらに，このタンパク質の変性温度は 100 °C 以上であり，タンパク質としては異常な熱安定性をもつことも明らかにした。これらの結果をまとめ論文を投稿中である。また，更なる活性向上を目指した研究を継続中である。
- b) タンパク質複合体の協奏的な機能をアロステリックに（触媒活性部位から離れた部分から）制御する手法を考案し，タンパク質複合体である回転モータータンパク質 V_1 -ATPase の協奏的な機能である回転能を制御することに成功した。これまでに回転モーターの変異体は多数作られてきたが，回転速度を向上させたものは存在せず，天然が長い年月をかけて生み出した精密な機械である回転モーターの機能を向上することは不可能ではないかと思われていた。ここで，我々は，半世紀以上も前に提唱されたが，誰も創り出すことはできていなかったアロステリック部位を設計することで，その回転を加速することに成功した。2023 年度，その成果を論文としてまとめ，*Nature Chemistry* 誌に出版した。現在，進化の過程で機能を失った擬似酵素に注目するこの手法を用いて，他の様々なタンパク質（例えば，並進型分子モーターであるキネシン）を改造し，その協奏的機能の制御を目指した研究を行っている。また，細胞内では回転モーターのように常時決まった複合体状態で機能を発揮するタンパク質複合体だけでなく，その構成タンパク質を変えながら機能を発揮するものも多い。そこで，構成タンパク質の組み合わせを変えることで，その機能を制御する研究も行っている。これらの研究を通して，様々なタンパク質複合体の協奏的機能の理解と制御を目指している。
- c) 改造したタンパク質複合体を細胞内に戻すことで，細胞内でのタンパク質複合体の機能の理解と細胞機能の制御を目指した研究を行っている。例えば，細胞が栄養状態などの環境の変化に応答するために中心的な役割を果たしている TOR 複合体は，その構成タンパク質の組み合わせを変えながら機能を果たす。そして，特定の構成タンパク質の組み合わせの複合体を欠損させると細胞の寿命が延びることも明らかとなっている。この TOR 複合体の構成タンパク質の組み合わせを合理的に変え，細胞の寿命を制御する研究を行い，これまで同じと考えられていた二つの複

合体状態が寿命に対して異なる働きをすることを発見した。この結果は、哺乳類を含めた様々な生物の寿命を制御できる可能性を期待させるものである。2023 年度、その成果をまとめ、*Journal of Cell Science* 誌に論文を出版した。さらに、既知の擬似酵素の改造だけでなく、未知の擬似酵素を探索し、それらを利用した細胞制御技術の開発も始めている。

- d) 構成的なアプローチにより蛍光タンパク質の設計原理の解明を目指した研究を進めている。また、細胞内イメージングに役立つ各種蛍光タンパク質の開発も行っている。これまでに、溶解性を上げた数種類の蛍光タンパク質の開発に成功しており、いくつかの結晶構造も得た。現在、その性能の最終評価を行いながら、論文投稿に向けて結果をまとめている。

B-2) 国際会議のプロシーディングス他

T. KOSUGI, M. TANABE and N. KOGA, “De Novo Design of ATPase Based on the Blueprint Optimized for Harboring the P-Loop Motif,” *bioRxiv* 2024.10.03.616451 (2024). DOI: 10.1101/2024.10.03.616451

B-3) 総説、著書

T. KOSUGI and N. KOGA, “Develop a Strategy to Design Artificial Allosteric Sites in Protein Complexes—Rate Acceleration of Rotary Molecular Motor—,” *Photon Factory Highlights* 2023, 24–25 (2024).

小杉貴洋, 「[ノーベル化学賞 2024] 不可能と思われていたタンパク質の構造予測とデザインの扉が開かれた」, *科学*, **94**(12), 1101–1105 (2024).

小杉貴洋, 「David Baker 研究室を振り返って」, *化学*, **79**, 27 (2024).

小杉貴洋, 「構造解析が導いたタンパク質の改造とその理解」, *PHOTON FACTORY NEWS*, **42**(1), 26 (2024).

B-4) 招待講演

小杉貴洋, 「タンパク質のデザインと構造予測～機械学習がノーベル賞をもたらした?～」, JST「計測・解析基盤」×「データ科学」研究交流会, 東京, 2025 年 2 月.

T. KOSUGI, “Creation and control of ATPase by computational protein design,” Protein Trajectories Symposium, Tokyo, December 2024.

小杉貴洋, 「構造モデルに基づいた合理的改造により出芽酵母 TOR 複合体の機能に迫る」, 第 47 回日本分子生物学会年会シンポジウム「やっぱり大事な TOR シグナリング～複層的 TOR の包括的理解へ向けて～」, 福岡, 2024 年 11 月.

小杉貴洋, 「タンパク質機能の合理的設計・制御とその応用」, 酵素工学研究会 第 92 回講演会, 川崎, 2024 年 11 月.

小杉貴洋, 「タンパク質の設計・改造: 計算結果を自ら実験で検証する」, 第 97 回日本生化学会大会シンポジウム「高速分子動画: その先へ」, 横浜, 2024 年 11 月.

小杉貴洋, 「ノーベル化学賞 2024『タンパク質のデザインと構造予測』」, 第 14 回 CSJ 化学フェスタ 2024「2024 ノーベル賞解説講演」, 東京, 2024 年 10 月.

小杉貴洋, 「計算機を用いたタンパク質の設計・改造」, 第 458 回 CBI 学会講演会「創薬の多様化に対応するタンパク質構造観察技術の進化」, オンライン開催, 2024 年 8 月.

小杉貴洋, 「蛋白質デザインにおける構造ダイナミクスについて考える」, 基礎から学ぶ最新 NMR 解析法第 9 回ワークショップ—AI を活用した NMR 解析—, 吹田, 2024 年 8 月.

T. KOSUGI, “Understanding and controlling functions of protein complexes by computational protein design,” 2024 Frontier Symposium in Computational Chemistry, Biophysics, and Biological Sciences, Seoul (Korea), November 2024.

T. KOSUGI, “Diffraction method for current and future protein design,” Diffraction Methods in Structural Biology 2024, Berlin (Germany), July 2024.

B-6) 受賞, 表彰

小杉貴洋, 第 13 回自然科学研究機構若手研究者賞 (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会分野別専門委員 (E-05 タンパク質設計・ドラッグデザイン) (2025).

学会の組織委員等

第 13 回分子モーター討論会世話人 (2024).

学会誌編集委員

生物物理学会誌編集委員 (2025–2026).

B-8) 大学での講義, 客員

九州大学先導物質化学研究所, 研究指導者, 2024 年 4 月–2025 年 3 月.

静岡大学, 非常勤講師, 2024 年 10 月–2025 年 2 月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきがけ研究, 「タンパク質複合体を合理的に改造し, 細胞内機能を理解・制御する」, 小杉貴洋 (2020 年度–2024 年度).

科研費基盤研究 (B), 「調節分子の違いが生み出すアロステリーの向上と拡張」, 小杉貴洋 (2024 年度–2028 年度).

科研費基盤研究 (B), 「還元的手法と構成的手法を組合せた蛍光蛋白質の設計原理の解析と新規蛍光蛋白質開発」 (代表者: 今村博臣), 小杉貴洋 (研究分担者) (2024 年度–2026 年度).

自然科学研究機構 OPEN MIX LAB (OML) 公募研究プログラム (研究共創型), 「並進型分子モーターの改造: 細胞分裂の制御を目指して」, 小杉貴洋 (2024 年度).

科学技術振興機構さきがけ研究, 「失われたタンパク質機能を復活・拡張する細胞制御技術の開発」, 小杉貴洋 (2024 年度–2027 年度).

(公財) 住友財団基礎科学研究助成, 「構成的アプローチによる De Novo 設計 ATP 加水分解酵素の高活性化」, 小杉貴洋 (2024 年度–2026 年度).

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）

佐藤 拓朗（助教）

WU, Dongfang（特任研究員）

後藤 拓（大学院生）

竹脇 由佳（大学院生）

楠本 恵子（大学院生）

村田 了介（技術支援員）

石川 裕子（事務支援員）

A-1) 専門領域：分子物性科学

A-2) 研究課題：

- a) キラル有機超伝導体を用いたスピントロニクス
- b) キラル分子によるスピン偏極の理論構築
- c) 交代磁性体の非相対論的検出

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機キラル超伝導体である κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ 塩の薄膜単結晶を用いたスピントロニクスデバイスを作製し、その電気的磁気的特性を測定した。その結果、超伝導転移点付近で交流による励起を行うと、磁場と平行に印可した電流において非相反現象が見出された。これは超伝導結晶のキラルな空間群に基づくスピン流生成が原因であると考えられるが、その大きさを見積もると、理論的な予想値よりもはるかに高いスピン偏極が生じていることが示唆された。また、電流を印加する方向によって臨界電流が異なる超伝導ダイオード効果も観測することに成功した。
(BEDT-TTF = Bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene)
- b) CISS (Chirality-Induced Spin Selectivity) 効果はキラル分子に対してトンネル電流を流すと、分子を通過してきた電子のスピンが電流と平行あるいは反平行に偏極する現象であり、近年新たな有機スピントロニクス的手段として注目されつつある。我々は、CISS 効果の根本的なメカニズムを解明するために、キラル物質の量子論的理解に取り組んだ。その結果、電子の量子状態を多極子展開することにより、キラリティの秩序変数を表現することが可能となり、分子のキラリティを量子力学的に表現するためにはスピンの本質的な役割を果たすことを明らかにした。この事実は、キラル分子が巨大なスピン偏極を生み出す CISS 効果と、根本的なところでつながっている可能性がある。
- c) 強磁性体・反強磁性体に続く第三の磁性体として注目されている、交替磁性体のスピン流検出に取り組んだ。理論計算により、 κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl 塩は交替磁性体であり、電場誘起スピン流を生成することが予想されているが、その検証はまだ為されていない。その原因のひとつは、系が絶縁体であるために効率的な輸送現象計測が困難であることであると想定される。そこで我々は外場制御により、より伝導性の高い状況を実現し、その条件でのスピン流生成を試みた。その結果、スピン流を起源とすると思われる特殊なホール効果の検出に成功した。

B-1) 学術論文

H. M. YAMAMOTO, “Rolling Carbon on a Rock: Graphene,” *Nat. Mater.* **24**, 330–331 (2025). DOI: 10.1038/s41563-025-02151-8

H. KUSUNOSE, J. KISHINE and H. M. YAMAMOTO, “Emergence of Chirality from Electron Spins, Physical Fields, and Material-Field Composites,” *Appl. Phys. Lett.* **124**(26), 260501 (2024). DOI: 10.1063/5.0214919

A. INDA, R. OIWA, S. HAYAMI, H. M. YAMAMOTO and H. KUSUNOSE, “Quantification of Chirality Based on Electric Toroidal Monopole,” *J. Chem. Phys.* **160**(18), 184117 (2024). DOI: 10.1063/5.0204254

B-4) 招待講演

山本浩史, 「CISS 研究の現状と固体科学への展開」, 日本物理学会年次大会シンポジウム「キラリティがもたらす新現象の開拓と制御～CISS 効果を中心に～」, オンライン開催, 2025 年 3 月.

山本浩史, 「CISS 効果の固体デバイスへの展開」, 電気学会日本磁気学会共催「光と CISS と磁性錯体」研究会, 東京, 2025 年 1 月.

山本浩史, 「カイラリティと電子状態」, CREST トポロジ領域合同セミナー, 京都, 2024 年 11 月.

山本浩史, 「Spin-polarization control by chiral materials」, 物性研究所短期研究会「新物質開発・システム創成研究の最前線：分子・クラスターがもたらす物性と機能」, 柏, 2024 年 10 月.

山本浩史, 「キラリティとスピントロニクス」, 東京大学工学部物理工学科教室談話会, 東京, 2024 年 5 月.

H. M. YAMAMOTO, “Chiral molecules and helical electrons,” Solvay Workshop on Chirality, Spin and Reactivity, Brussel (Belgium), November 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Chirality-Induces Spin Selectivity in Various Materials,” Thailand-Japan Symposium in Chemistry 2024, Chiang Mai University, Chiangmai (Thailand), November 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Chiral Spintronics with Molecular Materials,” ISCOM2024, Anchorage (U.S.A.), September 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Chiral phonon-mediated circular photo galvanic effect,” Electron Spin in Chiral Matter — Sigtuna CISS meeting 2024, Sigtuna (Sweden), July 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Chiral Atoms and Helical Electrons,” META2024, Toyama (Japan), July 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Novel spintronics devices based on chiral materials,” Workshop on physics and electronics of 2D doped materials, Tateyama (Japan), June 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Chirality-Induced Spin Selectivity and Multipoles,” OIST-JST-AIMR Joint International Symposium: Interaction Between Various Chiral Fields and Chiral Materials, Okinawa (Japan), June 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Chirality-based spintronic devices with molecular materials,” ICSM2024, Dresden (Germany), June 2024.

H. M. YAMAMOTO, “Emergent Chiral Spintronics based on Molecular Materials,” CEMS Topical Meeting on Emergent Phenomena in Topological Quantum Materials, Wako (Japan), May 2024.

B-5) 特許出願

特開 2024-158274,「配向体製造装置」, 平等拓範, 佐藤庸一, 青山正樹, 吉田久史, 木村幸代, 山本浩史, 伊東正篤, 井上龍夫, 長谷川順(自然科学研究機構), 2023 年.

WO2024225471(A1),「配向体製造装置」, 平等拓範, 佐藤庸一, 青山正樹, 吉田久史, 木村幸代, 山本浩史, 伊東正篤, 井上龍夫, 長谷川順(自然科学研究機構), 2024 年.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会幹事 (2020–2024), 総務委員長 (2022–2024).

学会の組織委員等

分子科学会運営委員 (2018–2024).

ISCOM2025 組織委員会組織委員長 (2025).

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 世界トップレベル研究拠点プログラム委員会拠点作業部会委員 (2023–2028).

日本学術会議事務局連携会員 (2023–2027).

東京大学物性研究所協議会委員 (2024–2026).

理科教育活動

「科学三昧 in あいち 2024」指導助言 (2024). (佐藤 拓朗)

その他

凝縮系科学賞審査委員 (2019–).

森野基金推薦委員 (2021–).

ELASTO-Q-MAT (Deutsche Forschungsgemeinschaft), Scientific Advisory Board (2022–).

Asian Young Scientist Fellowship (physical science), Selection Committee member (2022–).

Chirality at the nanoscale, International Advisory Board (2023–).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員主管研究員, 2023 年 4 月–2026 年 3 月.

東京大学大学院工学系研究科, 教授, 2024 年 4 月–2026 年 3 月.

理化学研究所, 客員研究員, 2022 年 10 月–2025 年 3 月. (佐藤拓朗)

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「キラル伝導体を用いた巨大スピン偏極デバイスの開発」, 山本浩史 (2023 年度–2026 年度).

科学技術振興機構さきがけ研究(受託研究),「キラルな分子性物質を舞台にした強相関スピントロニクスの開拓」, 佐藤拓朗 (2023 年度–2024 年度).

日本学術振興会研究拠点形成事業(A. 先端拠点形成型),「量子創発分子層エレクトロニクス」山本浩史 (2024 年度–2028 年度).

科学技術振興機構創発的研究支援事業(基金)(受託研究),「創発的研究推進のための研究環境整備」, 山本浩史 (2024年度-2025年度).

科研費基盤研究(B),「キラル超伝導デバイス設計による巨大スピン偏極流の自在制御」, 佐藤拓朗 (2024年度-2026年度).

科研費基盤研究(B),「カイラリティが誘導するフォノン・スピン・フォトン交差結合の理論」(代表: 岸根順一郎), 山本浩史(研究分担者) (2021年度-2024年度).

科研費基盤研究(A),「カイラル物質が誘導する非局所スピン偏極の解明と基礎学理の構築」(代表者: 戸川欣彦), 山本浩史(研究分担者) (2023年度-2026年度).

B-11) 産学連携

共同研究, (株) アステム, 「アイ・ドラゴン 4 の機能を広範囲に警報周知するシステムへと機能を拡張する可能性に関する共同研究 2」, 山本浩史 (2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

キラリティによるスピン流生成は、近年益々注目されるようになっている。どちらかと言うと化学分野で注目されている CISS のみならず、物性物理分野でも空間反転対称性を失った物質構造に基づく新たな物性発現が盛んになされており、両者の共通点と相違点を検討しながら実験を進めていく必要があると考えられる。さらに空間反転対称性の破れのみならず、時間反転対称性の破れについても、様々なスピン物性の源となることが明らかになってきた。その文脈において、交替磁性体の物理も今後より発展していくことが期待できる。このようにキラル物質特有の性質、あるいは交替磁性体特有の性質を用いて、様々な外場によるスピン流の生成・制御に取り組んでいきたい。

4-4 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）

甲田 信一（助教）

TANG, Zhiye（助教）

KUMAR, Shubham（特任研究員）

ZHU, Zhe（大学院生）

鶴間 稜平（大学院生）

千葉 史朱香（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，理論化学

A-2) 研究課題：

- a) 生体機能ダイナミクスの理論研究：天然光合成系における効率的励起エネルギー移動
- b) 凝縮系ダイナミクスの理論研究：顕著な構造変化を伴わない過冷却液体の運動の遅延化
- c) 凝縮系ダイナミクスの理論研究：揺らぎエネルギー障壁を越える反応・拡散過程

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 生体機能ダイナミクスに関する研究として、高等植物の光化学系 II の光捕集アンテナ複合体 LHCII における励起エネルギー移動（EET）の解析を進めている。LHCII 中の EET の解明には、クロロフィル（Chl）分子の励起エネルギーやその揺らぎ（スペクトル密度）の知見が不可欠である。最近、我々は TDDFT 計算におけるパラメータの調整を行い、異なる誘電率をもつ複数の溶液中での Chl 分子の励起エネルギーを適切に記述することに成功した。さらに、これらの適切な電子状態計算の結果を再現する分子動力学（MD）計算における Chl 分子のパラメータの開発にも成功し、LHCII 中の Chl 分子の吸収スペクトルなどの実験結果を再現できることを確認した。これらの成果に基づき、現在、LHCII における励起エネルギー移動がどのように起こっているかについて解析を進めている。
- b) 凝縮系ダイナミクスに関する研究として、温度低下による過冷却液体のダイナミクスの遅延化の分子起源の解明に取り組んでいる。過冷却液体状態は、構造的には通常の液体状態と類似しているが、ダイナミクスに関しては、液体状態のものに比べ著しく遅いという特徴をもつ。液体から結晶への変化のような顕著な構造変化を伴わない過冷却液体の運動の遅延化の機構解明は、凝縮系物理学における長年の課題の一つである。我々は、反応理論において提案された「動的乱れ」の概念に基づき、過冷却水における運動の遅延化における分子機構を明らかにした。これらの成果に基づき、現在、水以外の過冷却液体やシリカなどの粘性液体の遅延化機構について解析を進めている。
- c) 凝縮系ダイナミクスに関する研究として、拡散過程における揺らぎの影響に関する課題にも取り組んでいる。化学的および物理的性質が非常に似ている軽水と重水の分離は、極めて困難であることが知られている。最近、京都大学の北川特別教授らが開発した多孔質配位高分子により、従来にない高効率で同位体水の分離が可能であることが示された。しかし、その同位体水の分離機構については未だ解明されていない。そこで、北川グループとの共同研究として、実験を反映した理論モデル系を構築し、実験で見出された質量比を超える拡散係数の比の分子機構について解析を進めている。

B-1) 学術論文

A. CHANDRA, S. SAITO and A. CHANDA, “Effects of Cations on the Structure, Dynamics and Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy of Liquid/Vapor Interfaces of Aqueous Solutions of Monovalent and Divalent Metal Nitrates,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27**, 6154–6167 (2025). DOI: 10.1039/D4CP04413D

Z. ZHU, M. HIGASHI and S. SAITO, “Development of Molecular Dynamics Parameters and Theoretical Analysis of Excitonic and Optical Properties in the Light-Harvesting Complex II,” *J. Chem. Theory Comput.* **21(1)**, 413–427 (2025). DOI: 10.1021/acs.jctc.4c01214

S.-I. KODA and S. SAITO, “Flat-Bottom Elastic Network Model for Generating Improved Plausible Reaction Paths,” *J. Chem. Theory Comput.* **20(16)**, 7176–7187 (2024). DOI: 10.1021/acs.jctc.4c00792

S. SAITO, “Unraveling the Dynamic Slowdown in Supercooled Water: The Role of Dynamic Disorder in Jump Motions,” *J. Chem. Phys.* **160(19)**, 194506 (2024). DOI: 10.1063/5.0209713

R. MALIK, S. SAITO and A. CHANDRA, “Effect of Counterions on the Structure and Dynamics of Water near a Negatively Charged Surfactant: A Theoretical Vibrational Sum Frequency Generation Study,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26(24)**, 17065–17074 (2024). DOI: 10.1039/D4CP00537F

B-4) 招待講演

S. SAITO, “Exploring the molecular origins of water’s anomalies and slow dynamics,” Korea-Japan Molecular Symposium, Pusan (Korea), June 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会運営委員 (2022–2024).

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

Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS2025) 組織委員 (2022–2025).

学会誌編集委員

日本化学会速報誌編集委員会委員 (2023–).

その他

森野基金 運営委員会委員 (2020–).

計算物質科学協議会 運営委員会委員 (2020–).

B-8) 大学等での講義, 客員

Indian Institute of Technology Kanpur, 客員教授, 2020年4月–2025年3月.

B-9) 学位授与

ZHU, Zhe, 「Theoretical study of the excitonic properties and excitation energy transfer dynamics in light-harvesting complex II」, 2025年3月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「高等植物の光捕集アンテナタンパク質における効率的励起エネルギー移動の理論研究」, 齊藤真司 (2021年度–2025年度).

科研費挑戦的研究(開拓),「凝縮系反応・構造力学における動的乱れの解明に向けた理論・計算手法の開拓」, 齊藤真司 (2023年度–2026年度).

科研費若手研究,「シアノバクテリア時計タンパク質振動子の出力分子機構の理論的解明」, 甲田信一 (2022年度–2024年度).

B-11) 産学連携

共同研究, (株) ダイセル,「木質バイオマスの溶解シミュレーションに関わる共同研究」, 齊藤真司 (2022年度–).

C) 研究活動の課題と展望

我々は、生体分子系の機能および凝縮系のダイナミクスに関する理論研究を進めている。これらの研究に関する展望は、以下の通りである。

生体機能に関するダイナミクスに関しては、高等植物のLHCIIにおける励起エネルギー移動の分子機構の解明を進める。励起エネルギー移動の分子論的解明には、LHCII系の個々のChl分子の適切な電子状態とダイナミクスの記述が不可欠である。我々は、これらの物理量を適切に記述する方法論の開発に成功し、膜中に存在するLHCIIにおける励起エネルギー移動ダイナミクスの解析を可能にした。今後は、LHCII内の不均一な環境下でのChl分子の励起ダイナミクスを解析し、LHCIIにおける高速なEETダイナミクスの分子レベルでの解明を目指す。これまでに、我々は緑色硫黄細菌のFMOタンパク質における励起エネルギー移動を解析し、各色素分子のエネルギー揺らぎがFMOタンパク質中の効率的な励起エネルギー移動に重要な役割を果たしていることを明らかにしてきた。今後は、LHCIIにおける励起エネルギー移動の解析を進め、LHCIIとFMOタンパク質の励起エネルギー移動を比較し、天然光合成系における励起エネルギー移動の理解を一層深めたい。さらに、バクテリアと高等植物という異なる進化段階における励起エネルギー移動の普遍性および特異性を明らかにしたい。

凝縮系ダイナミクスに関する研究として、構造変化や反応・拡散過程がどのように進行するかについて、研究を進める。構造変化ダイナミクスに関しては、(過冷却)液体における運動の遅延化の分子機構の解明を目指す。液体状態からガラス状態に向かう構造緩和の時間や粘性率の温度依存性に基づき、全ての液体はアレニウス則に従う「strong液体」と、温度低下とともに緩和時間や粘性率が急激に増加し超アレニウス性を示す「fragile液体」に大別される。温度低下に伴う液体の運動の遅延化は一見当たり前の現象に思われる。しかし、異なる温度依存性を持つこれらの液体のダイナミクスの遅延化が、どのような分子機構に由来するのかは凝縮系物理学の長年の課題であり、未だに解明されていない。今後は、異なるfragilityをもつ液体における運動の遅延化がどのように起こるのかについて、体系的な理解の獲得を目指す。また、反応・拡散過程に関する課題として、多孔質配位高分子系による同位体水の高効率分離の分子機構の解明に向けた研究をさらに進める。これらの構造変化・拡散ダイナミクスの研究で明らかになってきたように、揺らぐ環境下では動的乱れや共鳴活性化などにより、反応や構造変化・拡散ダイナミクスが興味深い様相を示す。そこで、これまで物理化学的な研究が進んでいなかったこれらの観点から、揺らぐ環境下における反応や拡散現象に関する研究の展開を目指す。

理論分子科学第二研究部門

石崎 章仁（教授）（2016 年 4 月 1 日～2024 年 9 月 30 日）*）

三輪 邦之（助教）

布能 謙（特任助教）

増田 道子（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) 昨年度までの研究では、自発的パラメトリック下方変換によって生成される量子もつれ光子対の非古典相関を利用した時間分解分光の理論を構築してきた。しかし、一対のもつれ光子を分子系に照射して誘起される非線形光学応答は非常に弱く、検出が困難であると予想される。本年度は、この問題を解決する手段として、もつれ光子を用いた時間分解蛍光分光計測を理論的に検討した。提案する方法では、もつれ光子対の一方を色素分子に照射し、残りの一光子と分子からの蛍光光子を同時計数計測する。光子検出には位置検出型の単一光子検出カメラを用い、分光器と組み合わせることで二光子の時間情報と周波数情報を同時に取得し、分子系における時間分解スペクトルを得ることができる。この方法は、もつれ光子対のうち一方のみを分子に照射するため、現在の光子検出技術でも十分な信号強度が得られるという利点がある。また、本研究の量子分光法は非線形光学シグナルとして誘導放出の寄与のみを抽出できることを理論的に示した。この結果により、得られるスペクトルの解釈が大幅に簡略化でき、たとえば光合成光捕獲タンパク質などの複雑分子系におけるスペクトル解析を容易になる可能性がある。
- b) 三重項-三重項消滅（TTA）を利用したエネルギーアップコンバージョン（TTA-UC）は、太陽電池や発光ダイオードなどの光電子デバイスの性能向上に寄与することが期待され、産業技術への応用の観点から高い注目を集めている。特に、固体材料において高効率な TTA-UC を実現することは、これらのデバイスへの応用に向けた重要な課題の一つである。近年、固体中の分子配向や分子間の三重項励起子の移動レートが TTA-UC の効率に与える影響について活発な議論がなされている。特に、三重項励起子の移動に伴い、励起子間に働く交換相互作用の大きさや、励起子が位置する分子配向が変調する点に着目したモデルが提案され、高い TTA-UC 効率の説明が与えられている。しかし、TTA-UC 効率がモデル内のパラメータにどのように依存するかについては未解明な部分が多く、さらなる高効率化のためには詳細な解析が肝要である。本研究では、TTA-UC 効率が分子配向および三重項励起子の移動レートにどのように依存するのかを理論的に解析し、効率向上のための条件を明らかにすることを試みた。2つの三重項励起子が TTA 過程を介し高エネルギーの一重項励起子を形成する確率 η を計算した結果、以下の3点を明らかにした。(1) 三重項励起子が位置する分子同士がある程度離れ、2つの励起子間に働く交換相互作用が弱い場合、それらが位置する分子の相対的な配向が平行に近づくほど、 η が向上する。(2) 分子間を移動する2つの三重項励起子について、それらが位置する分子ペア同士において、分子の相対的な配向が揃っているほど、 η が向上する。(3) 三重項励起子の移動レートが遅く、励起子間に強い交換相互作用が働く分子ペアと弱い交換相互作用が働く分子ペアと

の間で三重項励起子ペアが移動するレートが遅いほど、 η が向上する。以上の成果から得られる知見は、TTA-UC のさらなる高効率化に向けた分子設計の指針の提示に貢献することが期待される。

B-1) 学術論文

K. FUNO and A. ISHIZAKI, “Dynamics of a Quantum System Interacting with White Non-Gaussian Baths: Poisson Noise Master Equation,” *Phys. Rev. Lett.* **132**(17), 170402 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevLett.132.170402

K. MIWA, S. SAKAMOTO, K. FUNO and A. ISHIZAKI, “Coarse-Grained Description of Anharmonic Lattice Environments Affecting the Quantum Dynamics of Charge Carriers,” *Phys. Rev. Res.* **7**, 013323 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.7.013323

E. KIM, D. LEE, S. SAKAMOTO, J.-Y. JO, M. VARGAS, A. ISHIZAKI, J. MINAGAWA and H. KIM, “Network Analysis with Quantum Dynamics Clarifies Why Photosystem II Exploits Both Chlorophyll *a* and *b*,” *Sci. Adv.* **11**, eads0327 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.ads0327

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI and K. MIWA, “Control and enhancement of single-molecule electroluminescence through strong light-matter coupling,” Telluride Workshop on Strong Light-Matter Interactions, Telluride Intermediate School, Telluride, CO (USA), June 2024.

A. ISHIZAKI and K. MIWA, “Quantum dynamics of photoexcited electronic systems coupled to anharmonic oscillator environments,” Telluride Workshop on Strong Light-Matter Interactions, Telluride Intermediate School, Telluride, CO (USA), June 2024.

石崎章仁, 「量子性と環境揺らぎが織りなす分子物質機能」, 第1回スピシンフォニー化学研究会, 京都大学桂キャンパス, 京都府京都市, 2024年6月.

A. ISHIZAKI and Y. FUJIIHAHI, “Potential of time-resolved optical spectroscopy with quantum entangled photons,” Coherent Multidimensional Spectroscopy 2024, National STEM Learning Centre, University of York, York (UK), June 2024.

石崎章仁, 「私の海外修行」, 日本学術振興会特別研究員-DC フレンドシップミーティング 2024 in Kyoto, 京都国際会議館, 京都府京都市, 2024年6月.

石崎章仁, 「Network analyses with quantum dynamic calculations on energy flow in the photosystem II supercomplex」, 第107回KPSIセミナー, 量子科学技術研究開発機構 関西光量子科学研究所, 京都府木津市, 2024年8月.

Y. FUJIIHAHI and A. ISHIZAKI, “Theory of time-resolved optical spectroscopy with quantum entangled photons,” Quantum Innovation 2024: International Symposium on Quantum Science, Technology and Innovation, Sora City Conference Center, Chiyoda-ku, Tokyo (Japan), October 2024.

A. ISHIZAKI, “Exploring the dynamics in molecular systems with quantum science/technology,” New Theoretical and Computational Perspectives for the Quantum Technology of Molecular Systems, Graduate Center, City University of New York, New York, NY (USA), February 2025.

A. ISHIZAKI, “Exploring the dynamics in molecular systems with quantum science/technology,” Les Houches School of Physics Workshop on Quantum Dynamics and Spectroscopy of Functional Molecular Materials and Biological Photosystems, Les Houches (France), March 2025. (スケジュールの都合によりキャンセル。)

石崎章仁,「量子効果の維持と崩壊が織りなす光捕集・エネルギー変換ダイナミクス」,日本化学会第 105 春季年会「エキシトン操作の新展開と展望」,関西大学千里山キャンパス,大阪府吹田市,2025 年 3 月.

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 (2019–2024).

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協議会委員 (2022–2024).

学会誌編集委員

日本物理学会会誌編集委員 (2023–2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学先端学術院分子科学コース,「基礎物理化学 2」,2024 年 7 月.

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 年度–2024 年度).

科研費若手研究,「単一分子接合系における光・電子・スピンの超高速ダイナミクスに関する理論的研究」,三輪邦之 (2021 年度–2024 年度).

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),「量子論的生命現象の解明・模倣」,石崎章仁 (研究分担者) (2020 年度–2024 年度).

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。

*) 2024 年 10 月 1 日東京大学大学院理学系研究科教授

計算分子科学研究部門

江原 正博（教授）（2008 年 6 月 1 日着任）

PRIYAKUMAR, U. Deva（外国人研究職員）

白男川 貴史（助教）

ZHAO, Pei（特任助教）

WANG, Yuelin（特任助教）

KONGKAEW, Nalinee（インターンシップ）

杉本 縁（事務支援員（派遣））

A-1) 専門領域：量子化学，理論化学，触媒化学，光物性科学

A-2) 研究課題：

- a) 金単原子エッチングによる CAu^{I}_5 クラスターの創製と機能化
- b) 担持金微粒子触媒界面のルイス酸密度の制御：C-O 結合および C-N 結合のホウ素化
- c) 酸化ニオブ固体触媒によるアルコール光酸化の反応機構
- d) PdAu_{12} クラスター触媒によるパラ置換ベンジルアルコールの酸化：Pd 原子ドーブの効果
- e) スズを含むペロブスカイト半導体の界面構造制御法の開発とメカニズム解明—高性能多接合型太陽電池の実現—
- f) 還元的アリール化による立体障害を利用した修飾単層カーボンナノチューブの発光波長制御

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) エッチングはナノ材料の構造や化学的・物理的特性を制御するための優れたトップダウン合成法である。原子レベルでの化学エッチングは、ナノサイズの金属クラスターを精密に合成する上で特に難しい課題である。本研究では、安定な金 (I) クラスター中のハイパーカーボン中心における金原子の単原子エッチングに成功した。具体的には、キラルな *N*-ヘテロ環カルベンで保護された C-中心の CAu^{I}_6 クラスターをビスホスフィンでエッチングし、C-中心の CAu^{I}_5 クラスターを得た。 CAu^{I}_5 クラスターは非常に大きな深色効果（バソクロミックシフト）を示し、発光色変化の起源を理論的に明らかにした。エッチング機構はタンデム解離-会合-脱離経路であることを実験的・理論的に明らかにした。さらに、 CAu^{I}_5 クラスターの中心炭素の空いたサイトに $\text{Au}^{\text{I}}\text{Cl}$ を導入し、Cを中心とする金 (I) クラスターのポスト官能基化を可能にした。
- b) 担持金属触媒は、金属ナノ粒子と担体との間に界面サイトを有し、複数の触媒成分が協働して分子間反応を効率的に促進する。担持金属触媒の活性な界面サイトを設計するための指針を確立することは、効率的なクロスカップリング反応を可能にするヘテロ接合触媒にとって不可欠である。本研究では、担持金触媒による C-O 結合および C-N 結合のホウ素化反応における金属と担体の協働効果を明らかにするために、速度論解析および理論解析を行い、担体のルイス酸密度が、金属ナノ粒子と担体表面のルイス酸点が協働する活性サイトの数を決定することを明らかにした。DFT 計算により、Au ナノ粒子と担体の界面におけるジボロンの強い吸着と、吸着したジボロンの LUMO 準位の低下が、効率的な C-O 結合ホウ素化に寄与することを明らかにした。金属-金属酸化物協同サイトを最適化した担持 Au 触媒である $\text{Au}/\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 触媒は、C-O 結合および C-N 結合ホウ素化に優れた活性を示し、連続フロー反応を用いた有機ホウ素化合物の高効率な合成を可能にした。

- c) 高効率固体光触媒が開発されているが、アルコールからカルボニル化合物への変換は、化学産業や有機合成において重要な反応である。これまで TiO_2 等の不均一系光触媒が開発されたが、反応条件の制限、低級アルコールの制約、低い選択性等の課題があった。最近、 Nb_2O_5 固体表面触媒が、アルコールの光酸化反応を低温で選択的に進行し、これらの課題を克服することが見出されたが、その反応機構や電子状態は十分に理解されていない。多層クラスターモデルを用いた量子化学計算により、吸着したアルコールから水素移動の後、 $\text{O}(2p)$ から $\text{Nb}(4d)$ への光電子移動励起が起これ、反応が進行する反応機構を解明した。表面-分子吸着系の吸収スペクトル・スピン密度・自然占有密度解析を行い、実験で観測されている UV-Vis スペクトル、EPR、速度方程式解析の結果を説明した。本研究は、固体光触媒の研究に有用な方法論とモデル化のアプローチを示した。
- d) 原子サイズ制御された金属ナノクラスターへの単原子ドーピングは、触媒作用におけるドーピング効果の解明に有用である。Co と Ce からなる二重金属水酸化物上に MAu_{12} ($\text{M} = \text{Au}, \text{Ir}, \text{Rh}, \text{Pt}, \text{Pd}$) ナノクラスターを合成し、ベンジルアルコール (BnOH) 酸化の触媒活性ならびに活性化機構を実験と理論計算の両面から解析した。 PdAu_{12} は Au_{13} の 4.4 倍の触媒活性を示し、他の MAu_{12} ($\text{M} = \text{Ir}, \text{Rh}, \text{Pt}$) 触媒は Au_{13} と同等の活性を示した。スラブモデル構造に基づく周期境界 DFT 計算により、酸素分子は Au_{13} よりも PdAu_{12} の方がより効率的に活性化されることが示され、活性化された酸素分子が介在する異なるメカニズムが Pd の単ドーピングによって現れることが示された。
- e) 多接合太陽電池は、単接合セルの放射限界を超える光電変換効率を達成する優れた性能を示す。また、高性能な Sn-Pb ペロブスカイト半導体膜を開発することは薄膜デバイスにとって極めて重要である。独自の添加剤としてアミノ酸基とカルボン酸基を分子内にもつフェニルアラニンを用いて Sn-Pb 系ペロブスカイト半導体の前駆体溶液に用いることで、高品質な Sn-Pb 系ペロブスカイト半導体膜を作製する手法を開発した。各種分光測定と理論計算により、塗布成膜過程でフェニルアラニンがペロブスカイトの構成イオンと相互作用し、スズ (II) 種が前駆体や添加剤との相互作用を支配していることを見出した。Sn-Pb ペロブスカイト層により、単接合セル、2 接合型タンデムセル、3 接合型タンデムセルの各デバイスでは、各々 0.91 V, 2.22 V, 3.46 V の開放電圧が得られ、23.9%, 29.7% (認証値 29.26%), 28.7% の高い光電変換効率を達成した。さらに初めて 4 接合型のペロブスカイトタンデム型デバイスを作製し、4.94 V の高い開放電圧と 27.9% の光電変換特性が得られることを実証した。
- f) 単層カーボンナノチューブ (SWCNT) の発光特性制御を目的として、修飾 SWCNT の設計・開発を行ってきた。本研究では一置換および二置換ヨードベンゼン誘導体を用いて還元的アリール化による波長制御を行った。置換ヨードベンゼンによる化学修飾により、アリール基上の置換基の位置によって化学修飾が変化し、発光強度と波長の制御を実現した。フェニル基の 2 位に Me 基または MeO 基を、3,5 位に Me 基を導入すると、各々 E_{11}^{**} PL (~1230 nm), E_{11}^{*} PL (~1100 nm) の選択性が増加した。理論計算から、オルト位の置換基の異性体の相対的安定性に対する効果は、ヒドロアリール化よりもジアリール化 SWCNT の方が大きいことが示された。実験と理論計算から、ベンゼン環上の置換基位置により発光波長を調節し、SWCNT 付加体の有利な結合配置、コンフォメーション異性体の相対安定性と発光波長に影響を与えることを明らかにした。

B-1) 学術論文

S. HU, J. WANG, P. ZHAO, J. PASCUAL, J. WANG, F. ROMBACH, A. DASGUPTA, W. LIU, M. A. TRUONG, H. ZHU, M. KOBER-CZERNY, J. N. DRYSDALE, J. A. SMITH, Z. YUAN, G. J. W. AALBERS, N. R. M. SCHIPPER, J. YAO, K. NAKANO, S.-H. TURREN-CRUZ, A. DALLMANN, M. GREYSON CHRISTOFORO, J. M. BALL, D. P. MCMEEKIN, K.-A. ZAININGER, Z. LIU, N. K. NOEL, K. TAJIMA, W. CHEN, M. EHARA, R. A. J. JANSSEN, A.

- WAKAMIYA and H. J. SNAITH**, “Steering Perovskite Precursor Solutions for Multijunction Photovoltaics,” *Nature* **639**, 93–101 (2025). DOI: 10.1038/s41586-024-08546-y
- Y. MAEDA, Y. IGUCHI, P. ZHAO, A. SUWA, Y. TAKI, K. KAWADA, M. YAMADA, M. EHARA and M. KAKO**, “Switching Photoluminescence Wavelength of Arylated Single-Walled Carbon Nanotubes by Utilizing Steric Hindrance in Reductive Arylation,” *Chem. –Eur. J.* **31(13)**, e202404529 (2025). DOI: 10.1002/chem.202404529
- C. H. LIN, W. K. SHIH, Y. KONNO, P. ZHAO, Y. MAEDA, M. EHARA, T. KOBAYASHI and A. YABUSHITA**, “Relaxation Dynamics of (6,5) Single-Walled Carbon Nanotube under Xylyl Functionalization,” *J. Electron. Mater.* **54(2)**, 985–995 (2025). DOI: 10.1007/s11664-024-11628-2
- S. MASUDA, H. HIRAI, P. ZHAO, S. TAKANO, M. EHARA and T. TSUKUDA**, “Substrate-Dependent Role of a Pd Dopant in PdAu₁₂ Catalysts in the Oxidation of *p*-Substituted Benzyl Alcohols: Promotion of Hydride Abstraction and Reductive Activation of O₂,” *ACS Catal.* **14(22)**, 17123–17131 (2024). DOI: 10.1021/acscatal.4c03871
- S. SHIRAI, S. MURATSUGU, H. MATSUI, K. HARADA, M. EHARA, H. NAKAI and M. TADA**, “Circularly Polarized Luminescence Induction on a Tb(III) Complex with a Tris(*o*-*tert*-Butylaryloxy)-Functionalized 1,4,7-Triazacyclononane Ligand Coordinating Chiral 1-Phenylethylamine,” *Chem. Commun.* **60(96)**, 14180–14183 (2024). DOI: 10.1039/D4CC05191B
- X. L. PEI, P. ZHAO, H. UBE, Z. LEI, M. EHARA and M. SHIONOYA**, “Single-Gold Etching at the Hypercarbon Atom of C-Centred Hexagold(I) Clusters Protected by Chiral N-Heterocyclic Carbenes,” *Nat. Commun.* **15(1)**, 5024 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-49295-w
- H. MIURA, K. IMOTO, H. NISHIO, A. JUNKAEW, Y. TSUNESADA, Y. FUKUTA, M. EHARA and T. SHISHIDO**, “Optimization of Metal-Support Cooperation for Boosting the Performance of Supported Gold Catalysts for the Borylation of C–O and C–N Bonds,” *J. Am. Chem. Soc.* **146(40)**, 27528–27541 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c08340
- Z. LEI, P. ZHAO, Z. J. GUAN, Z. A. NAN, M. EHARA and Q. M. WANG**, “‘Passivated Precursor’ Approach to All-Alkynyl-Protected Gold Nanoclusters and Total Structure Determination of Au₁₃₀,” *Chem. –Eur. J.* **30(42)**, e202401094 (2024). DOI: 10.1002/chem.202401094
- W. W. WANG, T. TANAKA and M. EHARA**, “Theoretical Study on the Mechanism of Alcohol Photooxidation on Nb₂O₅ Surface,” *J. Comput. Chem.* **45(25)**, 2128–2135 (2024). DOI: 10.1002/jcc.27435
- B. BOEKFA, T. MAIHOM, M. EHARA and J. LIMTRAKUL**, “Investigation of the Suzuki-Miyaura Cross-Coupling Reaction on Palladium H-Beta Zeolite with DFT Calculations,” *Sci. Rep.* **14(1)**, 611 (2024). DOI: 10.1038/s41598-023-51116-x
- B. ZHOU, P. ZHAO, J. GUO, Y. QIAO, S. HU, X. GUO, J. LIU and C. LI**, “Unlocking the Potential of Antisolvent-Free Perovskite Solar Cells: Modulating Crystallization and Intermediates through a Binary Volatile Additive Strategy,” *Nano Energy* **124**, 109487 (2024). DOI: 10.1016/j.nanoen.2024.109487

B-3) 総説, 著書

- B. SRIDHARAN, A. SINHA, J. BARDHAN, R. MODEE, M. EHARA and U. D. PRIYAKUMAR**, “Deep Reinforcement Learning in Chemistry: A Review,” *J. Comput. Chem.* **45(22)**, 1886–1898 (2024). DOI: 10.1002/jcc.27354

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

- M. EHARA**, “Inverse Design Approach of Molecular Aggregates and Molecule-Nanocluster Systems,” Indian Institute of Technology, Hyderabad, Hyderabad (India), July 2024.

M. EHARA, “Nanocluster and Heterogeneous Catalysis: Interplay between Theory and Experiment,” International Institute of Information and Technology (IIIT) Hyderabad, Hyderabad (India), July 2024.

M. EHARA, “Nanocluster and Heterogeneous Catalysis: Interplay between Theory and Experiment,” Sustainable Catalysis: Synthesis, Theory, and Applications (SusCat-STA 2024), Udaipur (India), July 2024.

M. EHARA, T. SHIRAOGAWA and P. ZHAO, “Electronic Structures and Optical Properties of Metal Nanoclusters,” The 8th Japan-Czech-Slovakia International Symposium on Theoretical Chemistry (JCS8), Sapporo (Japan), June 2024.

江原正博, 「量子化学に基づく理論精密分光」, 第三回冷却分子・精密分光シンポジウム, 調布, 2024年8月.*

江原正博, 「複雑電子系の光物性科学と触媒化学」, 第43回QCRIセミナー, 京都, 2024年8月.

白男川貴史, 「化合物空間の合理的探索と理論的体系化に向けた研究」, シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2024」, 京都, 2024年9月.

白男川貴史, 「分子・物質系の機械学習の基礎」, 2024年度分子研異分野技術交流セミナー (第4回) ～機械学習の材料開発への応用～, 岡崎, 2024年8月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

分子科学会運営委員 (2020–2024).

触媒学会界面分子変換研究会世話人会委員 (2015–), コンピュータの利用研究会世話人会委員 (2018–), 元素循環触媒超・研究会委員 (2022–2025).

量子化学研究協会理事 (2006–2026).

計算物質科学協議会, 運営委員会委員 (2020–2025).

学会の組織委員等

The XIth Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC), National Advisory Committee (2023–2025).

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計算物質科学研究センター運営委員会委員 (2020–2026).

東北大学金属材料研究所共同利用委員会および採択専門委員会委員 (2021–2025).

東京大学物性研究所データ創出活用型マテリアル研究開発プロジェクトデータ連携部会委員 (2022–2025).

名古屋大学情報連携推進本部 研究情報環境将来構想ワーキンググループ委員 (2024–2025).

学会誌編集委員

Journal of Computational Chemistry, Editor-in-Chief (2012–).

Theoretical Chemistry Accounts, Editorial Board (2015–).

The Chemical Record, Editorial Board (2015–).

Wiley Periodicals, Editor (2022–).

理科教育活動

出前授業「Science English (サイエンス・イングリッシュ)」愛知県立岡崎北高等学校 (2024). (ZHAO, Pei)

その他

量子化学スクール世話人 (2011–).

計算物質科学スパコン共用事業運営委員会委員 (2019-).

計算物質科学連絡会議委員 (2019-).

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ「マテリアルの高度循環のための技術 スポーク機関」データ構造化責任者 (2021-2031).

2024年度 ARIM 学生研修プログラム (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学先端学術院,「機能物性科学」, 2024年 5月.

B-10) 競争的資金

科研費学術変革領域研究(A) (計画研究),「超螺旋光に基づくキラル光物性の量子逆設計理論」, 江原 正博 (2022年度-2026年度).

科研費基盤研究(S),「光エネルギーの高度活用に向けた分子システム化技術の開発」(代表: 君塚信夫), 江原正博(研究分担者) (2020年度-2024年度).

科学技術振興機構CREST 研究,「多元素金属イオンクラスターの精密設計と自在配列が拓く新物質科学」(代表: 塩谷光彦), 江原正博(共同研究者) (2022年度-2027年度).

科学技術振興機構CREST 研究(受託研究),「多元素金属イオンクラスターの理論設計と反応機構解析」, 江原正博 (2022年度-2024年度).

科研費学術変革領域研究(A) (総括班),「光の螺旋性が拓くキラル物質科学の変革」(代表者: 尾松孝茂), 江原正博(研究分担者) (2022年度-2026年度).

科研費基盤研究(B),「熱的 1 電子移動を高度に制御する担持金属触媒の設計・開発と未利用資源活用への展開」(代表者: 三浦 大樹), 江原 正博(研究分担者) (2024年度-2026年度).

科研費若手研究,「鉛フリーペロブスカイト光触媒の理論設計: CO₂還元効率の向上」, ZHAO, Pei (2024年度-2026年度).

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。2022年度から、学術変革領域研究(A)「光の螺旋性が拓くキラル物質科学の変革」が発足した。量子逆設計理論を用いて、超螺旋光に基づくキラル光物性の理論解析・設計に関する研究を推進する。また、CREST「多元素金属イオンクラスターの精密設計と自在配列が拓く新物質科学」では、多元素金属イオンクラスターの光物性や触媒反応活性について理論解析・設計の研究を推進する。不均一系触媒の研究では、主に担持合金クラスターの触媒作用や反応機構について理論解析を実施する。

奥村 久士（准教授）（2009 年 5 月 1 日着任）

伊藤 暁（助教）

FARAH, Anne-Idil（インターンシップ）

TOOPRADAB, Borwornlak（インターンシップ）

大多和 克紀（大学院生）

鶴間 稜平（大学院生）

鈴木 日奈子（特別共同利用研究員）

森 丈（特別共同利用研究員）

川口 律子（事務支援員）

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) 流れによるアミロイド β ペプチドの凝集メカニズムの解明
- b) アミロイド β ペプチドの凝集過程を解明する大規模分子動力学シミュレーション
- c) アルギニンによるポリグルタミンタンパク質の凝集阻害効果の解明
- d) LEDGF の結合におけるヒストンメチル化の影響の解明

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 ($A\beta$) ペプチドの凝集体が原因で発症する。 $A\beta$ には 42 残基からなる $A\beta_{42}$ と 40 残基からなる $A\beta_{40}$ の 2 種類がある。我々は昨年度までに 2 本の $A\beta_{42}$ からなる系および 2 本の $A\beta_{40}$ からなる系の分子動力学シミュレーションを実行し、① $A\beta$ が β ヘアピン構造を形成している時に凝集しやすいこと、② $A\beta_{42}$ の方が $A\beta_{40}$ よりも β ヘアピン構造を形成しやすいため凝集しやすいこと、③ 5 番目のアミノ酸残基であるアルギニンが凝集のカギとなっていることを解明してきた。これらの成果によりタンパク質の凝集に関する理論研究で世界をリードしている。最近、生体膜表面上に血液やリンパ液の流れがあると $A\beta$ ペプチドの凝集が促進されることが明らかになった。しかし、その機構は分かっていない。この問題を解決するため、我々は昨年度生体膜表面で溶液の流れを発生させるための非平衡分子動力学シミュレーション法を開発した。この手法では生体膜の重心をラグランジュ未定乗数法で固定しながら、溶液には一定の加速度を加えて生体膜上の流れを作り出す。今年度はこの手法を用いて $A\beta(16-22)$ ペプチドの凝集過程のシミュレーションを行った。その結果、流れがある場合には流れがない場合よりも $A\beta(16-22)$ ペプチドの凝集が促進されることが分かった。これは実験と一致する結果である。さらにその理由も解明した。流れよりずりが生じると流れに乗って速く移動するペプチドと生体膜付近で流れに乗らずあまり速く移動しないペプチドが生じる。そのため流れに乗ったペプチドが流れに乗っていないペプチドに追いつき、出会う頻度が高まるため凝集が促進されるのである。
- b) より大規模に $A\beta$ の凝集過程を解明するために 32 本の $A\beta_{42}$ および $A\beta_{40}$ からなる系の分子動力学シミュレーションを実行している。これまでに 2.0 マイクロ秒のシミュレーションが完了した。これは世界最大の $A\beta$ の分子動力学シミュレーションである。その結果、 $A\beta_{42}$ も $A\beta_{40}$ も凝集と解離を繰り返しながら、徐々に凝集していくことを明らかにした。最終的に 32 量体など従来のシミュレーションよりも大きなオリゴマーの形成を再現することに成功した。また、 $A\beta_{42}$ の方が $A\beta_{40}$ よりも速く大きな凝集体を形成した。これは実験結果と一致するものである。さらに、 $A\beta_{42}$ も

Aβ40 も小さいオリゴマーでは比較的球状であるのに対し、大きくなると棒状に変化することも明らかにした。今後この形状変化の理由も含め、より詳細な凝集メカニズムを解明する。

- c) ポリグルタミンタンパク質はグルタミンの繰り返しが異常に拡張したもので、ハンチントン病などのポリグルタミン病を引き起こす。これまでの実験研究から、アルギニンがポリグルタミンタンパク質の凝集を抑制することが明らかになっている。アルギニンのポリグルタミンタンパク質凝集抑制機構とアルギニンだけが凝集抑制効果を持つ理由を明らかにするために、1本のポリグルタミンを含む系のレプリカ置換分子動力学シミュレーションを行った。その結果、アルギニンは同じく正電荷を持つリジンに比べてポリグルタミンタンパク質とよく水素結合を形成することが分かった。このことがアルギニンのポリグルタミンタンパク質凝集抑制機構を解明するうえでカギになると考えられた。さらに、その凝集に対する効果を検証するため、2本のポリグルタミンを含む系のレプリカ置換分子動力学シミュレーションを開始した。現在詳細な解析を進めている。
- d) 水晶体上皮由来成長因子（LEDGF/p75/PSIP1）はクロマチン結合タンパク質であり、遺伝子の転写にかかわっている。様々なタンパク質とクロマチンとの結合を仲介する役割を担っており、後天性免疫不全症候群（AIDS）、白血病、癌などの疾患との関連も報告されている。LEDGFのクロマチン結合部位はPWWPドメインであり、ヒストンH3の36番目のリジン残基（H3K36）がジメチル化またはトリメチル化されている時のみ結合することが知られている。我々はこのメチル化に依存した結合親和性の詳細を明らかにするために、PWWPドメインとヒストンフラグメントの分子動力学シミュレーションを行った。その結果、PWWPドメインとH3K36の結合には、疎水的相互作用だけでなく静電的相互作用も重要であることがわかった。また、水分子がモノメチル化または非メチル化状態のH3K36との結合を不安定化する要因であることも見出した。

B-1) 学術論文

H. KOYAMA, A. M. ITO, H. OKUMURA, T. OTANI, K. NAKAMURA and T. FUJIMORI, “Cell Position-Based Evaluation of Mechanical Features of Cells in Multicellular Systems,” *J. Theor. Biol.* **604**, 112070 (2025). DOI: 10.1016/j.jtbi.2025.112070

M. OTAWA, S. G. ITOH and H. OKUMURA, “Nonequilibrium Molecular Dynamics Method to Generate Poiseuille-Like Flow between Lipid Bilayers,” *J. Chem. Theory Comput.* **20(22)**, 10199–10208 (2024). DOI: 10.1021/acs.jctc.4c00750

M. YAGI-UTSUMI, Y. KANAOKA, S. MIYAJIMA, S. G. ITOH, K. YANAGISAWA, H. OKUMURA, T. UCHIHASHI and K. KATO, “Single-Molecule Kinetic Observation of Antibody Interactions with Growing Amyloid β Fibrils,” *J. Am. Chem. Soc.* **146(46)**, 31518–31528 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c08841

S. TANIMOTO and H. OKUMURA, “Why Is Arginine the Only Amino Acid That Inhibits Polyglutamine Monomers from Taking on Toxic Conformations?” *ACS Chem. Neurosci.* **15(15)**, 2925–2935 (2024). DOI: 10.1021/acscchemneuro.4c00276

H. KOYAMA, H. OKUMURA, T. OTANI, A. M. ITO, K. NAKAMURA, K. KATO and T. FUJIMORI, “Effective Mechanical Potential of Cell–Cell Interaction in Tissues Harboring Liquid Cavity and in Cell Sheet toward Morphogenesis,” *Front. Cell Dev. Biol.* **12(12)**, 1414601 (2024). DOI: 10.3389/fcell.2024.1414601

B-4) 招待講演

奥村久士,「分子動力学シミュレーションでアルツハイマー病の原因物質に迫る」, 国研セミナー, 岡崎市, 2024年7月.

奥村久士,「各種統計アンサンブルの生成法」, 第 18 回分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで—, 分子科学研究所, 岡崎, 2024 年 9 月.

S. G. ITOH, “Effect of H3K36 methylation on LEDGF binding studied by MD simulation,” Sugadaira Winter Workshop 2025 on the role of fluctuations and dynamics in bio and soft matter, Ueda (Japan), February 2025.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulation for disease-causative molecules,” Sugadaira Winter Workshop 2025 on the role of fluctuations and dynamics in bio and soft matter, Ueda (Japan), January 2025.

H. OKUMURA, “Protein aggregation and its inhibition observed by molecular dynamics simulation,” 4th International Conference on Materials Research and Innovation, Bangkok (Thailand), December 2024.

H. OKUMURA, “Molecular insight into protein aggregates to cause neurodegenerative disease,” Thailand-Japan Symposium in Chemistry, Chiang Mai (Thailand), November 2024.

H. OKUMURA, “Molecular Dynamics Simulation,” Molecular and Materials Science Academy, Bangkok (Thailand), October 2024.

H. OKUMURA, “SARS-CoV-2 RNA Polymerase and its Inhibitor Studied by Molecular Dynamics Simulation,” Chula Mini-Symposium Protein Dynamics in Living System, Bangkok (Thailand), September 2024.

S. G. ITOH, “MD simulation on A β peptides in a heterogeneous solvent,” Workshop on Biomaterial design inspired by the origin of life caused by liquid–liquid phase separation in dynamic solution environment, Bangkok (Thailand), September 2024.

H. OKUMURA, “Seeing protein aggregation and disaggregation by molecular dynamics simulation,” Workshop on biomaterial design inspired by the origin of life caused by liquid–liquid phase separation in dynamic solution environment, Bangkok (Thailand), September 2024.

S. G. ITOH, “Aggregation process of amyloid- β peptides using the replica-permutation method,” The 27th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 27), Bangkok (Thailand), August 2024.

H. OKUMURA, “Trends in molecular dynamics simulation research of amyloid- β aggregates,” The 27th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 27), Bangkok (Thailand), July 2024.

H. OKUMURA, “What I learned from Professor Fumiko Yonezawa,” Professor Fumiko Yonezawa Memorial Lecture Series, Newcastle (UK), April 2024.

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulation for the causative molecules of Alzheimer's disease,” Tribology group seminar, Department of mechanical engineering, Imperial College London, London (UK), April 2024.

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–).

分子シミュレーション学会 幹事 (2024–).

学会の組織委員等

XXXIV IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2023), Steering Committee member (実行委員) (2021–).

分子シミュレーション学会 分子シミュレーションスクール世話人 (2024–).

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附属物質設計評価施設スーパーコンピュータ共同利用課題審査委員会委員 (2024–2026).

高度情報科学技術研究機構学際共同研究 WG 委員 (2024–2025).

学会誌編集委員

ACS Chemical Neuroscience, Editorial Advisory Board (2024–).

その他

分子動力学シミュレーションの普及のため, 総研大の講義とは別にビデオカメラの前で講義を行い, それを YouTube で無料公開した: <https://www.youtube.com/watch?v=6B3BE7-iIPk> 合計約 16 時間かけて分子動力学シミュレーションの基礎から発展的な内容まで系統的に説明している。約 2 年 5 カ月で視聴回数は 9000 回を超えた。多くの他大学の先生方から研究室で大学院生向けの教材として活用していると聞く。全国の学生および若手研究者の育成に貢献している。

B-8) 大学等での講義, 客員

名古屋市立大学大学院薬学研究科, 客員准教授, 2019 年 4 月–.

東京大学物性研究所, 客員准教授, 2024 年 4 月–2025 年 3 月.

Kasetsart University, Faculty of Science, 講義講師「Molecular Dynamics Simulation」, 2024 年 10 月.

Kasetsart University, Faculty of Science, 講義講師「Molecular Dynamics Simulation」, 2025 年 2 月.

総合研究大学院大学先端学術院, 講義「生体分子シミュレーション」, 2024 年 4 月–2025 年 3 月.

中京大学, 非常勤講師, 2024 年 9 月–2025 年 3 月. (伊藤 暁)

Kasetsart University, Faculty of Science, 講義講師「Basic Statistical Mechanics and Monte Carlo Simulation」, 2025 年 2 月. (伊藤 暁)

B-9) 学位授与

大多和克紀, 「生体膜上に流れを発生させる非平衡分子動力学法の開発とその応用」, 2025 年 3 月, 博士 (理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (C), 「脂質膜上の流れによるペプチドの凝集促進機構を分子動力学シミュレーションで解明する」, 奥村久士 (2024 年度–2026 年度).

科研費基盤研究 (C), 「蛋白質ミスフォールディング病全般に対するペプチドを用いた治療法開発」(代表者: 中村和裕), 奥村久士 (研究分担者) (2024 年度–2026 年度).

C) 研究活動の課題と展望

- a) アミロイド β の Arg5 近傍の N 末端領域が変異した英国型変異体 (H6R) や鳥取型変異体 (D7N) は, 野生型よりも凝集速度が速く, 若年性アルツハイマー病を引き起こす傾向がある。これらの変異体では N 末端領域の正味の正電荷が野生型に比べて増加しているので, このことが凝集を促進している可能性を示唆している。今後, 分子動力学シミュレーションを行い, これらの変異体で凝集が促進される理由を明らかにする。

- b) ポリグルタミンタンパク質の凝集をアルギニンが阻害する現象に関して、我々は1本のポリグルタミンとアルギニンを含む系のシミュレーションを行い、アルギニンがポリグルタミンの分子内 β シート構造の形成を阻害する理由を解明した。現在、分子内 β シートの抑制が凝集阻害に及ぼす効果を解明するため、2本のポリグルタミンを含む系のレプリカ置換分子動力学シミュレーションを行っている。このシミュレーションを解析し、アルギニンが分子内 β シートの形成だけでなく凝集体の形成も阻害する理由を解明する。
- c) 山形大学の真壁教授らはアミロイド触媒構造を可溶性 β シート蛋白質PSAM(Peptide Self Assembly Mimics)に移植し、従来の酵素とは異なるタンパク質触媒を開発している。具体的にはPSAMの β シート部分にHis残基を8個導入した変異体(Cat-H8)とHis残基を24個導入した変異体(Cat-H24)を作製し、これらがエステル加水分解反応と脱リン酸化反応の触媒活性を有していることを示した。そこで、我々はその触媒機構を解明するため分子動力学シミュレーションを用いた理論研究を行っている。これまでにCat-H8とエステル加水分解反応を示す分子(p-NPA: p-nitrophenyl acetate)を含む系およびCat-H8と脱リン酸化反応を示す分子(p-NPP: p-nitrophenyl phosphate)を含む系の分子動力学シミュレーションを行った。今後、これらの結果からリガンドが近付きやすいアミノ酸残基を特定する。さらに、これらの情報を基に触媒活性機構解明のための解析を進める予定である。
- d) 神戸薬科大学の神谷教授らは人工核酸であるアミノ酸型人工核酸に着目し、新規核酸医薬の開発に取り組んでいる。我々は神谷教授らと協力して分子動力学シミュレーションによる人工核酸の研究に取り組んでいる。これまでに量子化学計算によりアミノ酸型人工核酸の1つであるL-aTNAの電荷パラメータを決定した。今後、人工核酸分子のレプリカ置換分子動力学シミュレーションを実行する。これまでのテスト計算で低温(300 K)から高温(450 K)までの幅広い温度範囲を変化させることに成功した。シミュレーション時間を延長して十分な構造サンプリングデータを生成し、主成分解析により自由エネルギー地形を計算する予定である。さらに比較対象としてDNAについても同様のシミュレーションと解析を実行する。DNAとL-aTNAの構造およびその揺らぎを比較検討する。

岡崎 圭一（准教授）（2020 年 12 月 1 日着任）

大貫 隼（助教）

MAHMOOD, Md Iqbal（特任研究員）

関 健仁（大学院生）

千葉 史朱香（事務支援員）

A-1) 専門領域：理論生物物理学

A-2) 研究課題：

- a) 分子モーターの 1 方向性運動メカニズムの解明
- b) トランスポーターの輸送メカニズムの解明
- c) タンパク質が引き起こす細胞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) 分子モーターは、生体内で ATP 加水分解エネルギーなどの化学エネルギーを消費して、1 方向性の運動をするタンパク質である。また、このような運動を阻害する因子が存在することが知られている。一例として、回転モーター F_1 -ATPase の回転運動を阻害する IF_1 があるが、興味深いことに、阻害状態を解除するには合成方向に回転させる必要があり、ここで再び 1 方向性の運動が必要になる。この 1 方向性の阻害状態解除メカニズムを分子シミュレーションによって解明する。シミュレーション中に、回転子にトルクをかけて加水分解・合成方向のそれぞれに回転させて、阻害因子・回転子の相互作用、回転に伴う仕事等の観点から解析を行なっている。また、ATP 合成酵素である V / A -ATPase の膜ドメインである V_o モーターにおける一方向回転メカニズムを全原子 MD シミュレーションで解明した。
- b) シュウ酸は多量に摂取すると、体内で尿管結石等の症状を引き起こす。このシュウ酸は腸内細菌により分解され制御されているが、その際にシュウ酸を細菌内に輸送するのがシュウ酸トランスポーターである。このシュウ酸トランスポーターの全原子 MD シミュレーションにおいて、構造変化に重要な部位の相互作用を人工的に弱めたシミュレーション（accelerated MD）を行い、これまで未知であった内開き構造を解明した。また、内開き構造になる際のコンタクト変化の解析と配列情報の共進化解析により構造変化に重要なアミノ酸残基を特定し、その残基を構造予測 AI である AlphaFold2 で変異させることで、内開き構造を安定化する変異を予測した。さらに、「浅い MSA」を用いた AlphaFold により幅広いトランスポーター構造を生成した後、それらを初期構造とした MD シミュレーションを実施するアプローチにより、トランスポーター構造ダイナミクスの効率的なシミュレーションが可能になった。
- c) 細胞膜は、多種多様なタンパク質と相互作用して、ダイナミックに変形する。例えば、エンドサイトーシスなどで見られるように一部切り離されて袋状構造（ベシクル）を作って細胞内外の物質輸送に使われる。このような細胞膜変形に関わるタンパク質が、膜を曲げる Pacsin1 や、GTP 加水分解エネルギーを用いて膜を切断するダイナミンである。我々は、全原子シミュレーションより大規模で長時間のシミュレーションが可能な粗視化 Gō-MARTINI モデルの開発を行って、Pacsin1 に応用することで、その構造揺らぎが正しく再現できることを示した。さらに、チューブ状膜とダイナミンの大規模多量体からなるシミュレーション系を構築して、ダイナミンによる膜切断の分子メカニズムに迫ろうとしている。

B-1) 学術論文

- K. KAWASHIMA, T. SATO, K. OKAZAKI, K. KIM, N. MATUBAYASI and T. MORI**, “Investigating the Hyperparameter Space of Deep Neural Network Models for Reaction Coordinates,” *APL Mach. Learn.* **3**, 016113 (2025). DOI: 10.1063/5.0252631
- J. KISHIKAWA, Y. NISHIDA, A. NAKANO, T. KATO, K. MITSUOKA, K. OKAZAKI and K. YOKOYAMA**, “Rotary Mechanism of the Prokaryotic V_0 Motor Driven by Proton Motive Force,” *Nat. Commun.* **15**(1), 9883 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-53504-x
- J. OHNUKI and K. OKAZAKI**, “Integration of AlphaFold with Molecular Dynamics for Efficient Conformational Sampling of Transporter Protein NarK,” *J. Phys. Chem. B* **128**(31), 7530–7537 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c02726
- K. OKADA, T. KIKUTSUJI, K. OKAZAKI, T. MORI, K. KIM and N. MATUBAYASI**, “Unveiling Interatomic Distances Influencing the Reaction Coordinates in Alanine Dipeptide Isomerization: An Explainable Deep Learning Approach,” *J. Chem. Phys.* **160**(17), 174110 (2024). DOI: 10.1063/5.0203346
- T. MATSUDA, S. SAKAI, K. OKAZAKI and T. NAGAI**, “Improvement of the Green-Red Förster Resonance Energy Transfer-Based Ca^{2+} Indicator by Using the Green Fluorescent Protein, Gamillus, with a Trans Chromophore as the Donor,” *ACS Sens.* **9**(4), 1743–1748 (2024). DOI: 10.1021/acssensors.3c02398

B-3) 総説, 著書

- 岡崎圭一, 「研究室だより「自然科学研究機構 分子科学研究所 岡崎研究室」, アンサンブル, **26**(2), 233–237 (2024).
- 岡崎圭一, 大貫 隼, 「タンパク質の構造変化予測～AlphaFold と分子動力学の統合～」, 実験医学別冊最強のステップUP シリーズ: AlphaFold 時代の構造バイオインフォマティクス実践ガイド～今日からできる! 構造データの基本操作から相互作用の推定, タンパク質デザインまで, 富井健太郎編, 第4章 1, pp. 184–190 (2024).
- 大貫 隼, 「分子シミュレーション×AlphaFold2 でトランスポータータンパク質の未解明構造を明らかにする」, 細胞, **56**(4), 326–328 (2024).

B-4) 招待講演

- 岡崎圭一, 「分子シミュレーションと AlphaFold の統合によるトランスポータータンパク質の構造変化ダイナミクス解明」, 第 463 回 CBI 学会講演会, オンライン開催, 2025 年 3 月.
- 岡崎圭一, 「タンパク質構造予測 AI: AlphaFold のリバースエンジニアリングと分子シミュレーション」, 2024 年度第 5 回物性アプリーオープンフォーラム, 東京大学 物性研究所, 柏, 2024 年 11 月.
- 岡崎圭一, 「分子シミュレーションと反応速度論・マルコフモデル」, 第 18 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, 2024 年 8 月.
- 岡崎圭一, 「分子シミュレーションと AlphaFold の統合によるタンパク質構造変化ダイナミクスの解明」, 物性研究所 パソコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の現在と未来」, 柏, 2024 年 4 月.
- K. OKAZAKI**, “Biomolecular simulation facilitated by AI,” Cyprus Meets Japan, The Cyprus Institute, Nicosia (Cyprus), November 2024.
- J. OHNUKI**, “Integration of AlphaFold with Molecular Dynamics to Uncover Missing Conformational States of Transporter Proteins,” International Conference on Theoretical and High Performance Computational Chemistry 2024, Wuhan (China), April 2024.

B-6) 受賞, 表彰

大貫 隼, 日本蛋白質科学会若手奨励賞優秀賞 (2024).

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 (2023–2025).

学会の組織委員等

分子シミュレーション学会幹事 (分子シミュレーションスクール担当) (2021–2025).

分子シミュレーションスクール世話人 (2016–).

分子シミュレーションスクール世話人 (2022–). (大貫 隼)

B-8) 大学等での講義, 客員

静岡大学大学院総合科学技術研究科農学専攻, 非常勤講師, 「フロンティア科学特論II」, 2024年12月.

総合研究大学院大学先端学術院, 「生体分子シミュレーション」, 2024年12月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「細胞膜変形分子マシンの動作メカニズム: 多量体形成と構造変化による膜変形の理論研究」, 岡崎圭一 (2022年度–2025年度).

科研費若手研究, 「蛋白質サイズの大規模構造遷移に適用可能な反応座標推定法の開発」, 大貫 隼 (2023年度–2025年度).

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。回転モーター F_1 -ATPase の阻害因子 IF_1 については, シミュレーションによる解析が進んでおり, その阻害メカニズムに基づいたデザインにより新規阻害因子の開発に繋げたい。シュウ酸トランスポーターについては, 今まで未知であった内向き開構造を明らかにしたので, その構造遷移における律速過程についての詳細な分子メカニズムを明らかにしていきたい。また, 他のトランスポーターへの展開も考える。細胞膜変形については, 細胞膜切断に関わるダイナミン多量体とチューブ状膜からなるシミュレーション系が構築できたので, 膜切断の分子メカニズムの解明を目指す。

4-5 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）

DE LÉSELEUC, Sylvain（特任准教授）

富田 隆文（助教）

周 鳥居 諭来（特任助教）

松原 卓也（特任助教）

田村 光（特任助教）

CHAUHAN, Vikas Singh（特任研究員）

JAUNET-LAHARY, Titouan（特任研究員）

KUMAR SINGH, Pushpander（特任研究員）

SRAKAEW, Kritsana（特任研究員）

TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh（特任研究員）

LIENHARD, Vincent（招へい研究員）

岡田 満哉（特別訪問研究員）

藤川 武敏（特命専門員）

川本 美奈子（特任専門員）

鈴井 光一（特任専門員）

牧野 茜（特任専門員）

松尾 友紀子（特任専門員）

犬飼 和久（特任専門員）

酒井 志帆（特任専門員）

伊神 賢人（特任専門員）

西岡 稚子（特任専門員）

GANESAN, Karthikeyan（インターンシップ）

MAITY, Arnab（インターンシップ）

KETAIAM, Kittisak（インターンシップ）

SIRIWORAKOONCHAI, Phatwarach（インターンシップ）

BRAUN, Eduard（インターンシップ）

ROUSSEL, Mathis（インターンシップ）

LERICHE, Axel-Ugo（インターンシップ）

DUPERON, Isaline（インターンシップ）

石坂 晴（インターンシップ）

SCHMID, Otto（インターンシップ）

MEMBREZ, Gaetan（インターンシップ）

BROSIG, Jule（インターンシップ）

KOCIK, Robin（大学院生）

DENECKER, Tom（大学院生）

HASSANALY, Sapna（大学院生）

KECIR, Omar（大学院生）

田中 愛登（大学院生）

ANTONIO, Jorge (大学院生)
渡部 元輝 (大学院生)
中井 愛里 (技術支援員 (派遣))
鶴田 笑子 (技術支援員 (派遣))
越田 陽子 (事務支援員)
山岸 芽衣 (事務支援員)
久樂 由莉耶 (事務支援員)
武井 美緒 (事務支援員 (派遣))
八幡 菜穂子 (事務支援員 (派遣))

A-1) 専門領域：量子物理学，量子コンピュータ，量子シミュレータ，原子分子光 (AMO) 物理学，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) バルク固体の極限コヒーレント制御
- g) 超高速量子シミュレータの開発
- h) 超高速量子コンピュータの開発

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 (~50 ナノケルビン) まで冷やした極低温のルビジウム原子をミクロンレベルで整列させた人工原子結晶にアト秒精度のコヒーレント制御法を適用することによって、3 万個の粒子の量子多体問題を近似無しに 1 ナノ秒 (ナノ = 10^{-9}) 以内でシミュレートできる世界唯一・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。
- h) 上記の人工原子結晶とアト秒精度のコヒーレント制御法を組み合わせた世界唯一・最速の「超高速量子コンピュータ」の開発を進めており、新規特許出願 2 件を行っている。

B-1) 学術論文

T. P. MAHESH, T. MATSUBARA, Y. T. CHEW, T. TOMITA, S. DE LÉSÉLEUC and K. OHMORI, “Generation of 480 nm Picosecond Pulses for Ultrafast Excitation of Rydberg Atoms,” *Opt. Lett.* **50**(2), 403–406 (2025). DOI: 10.1364/OL.538707

Y. CHEW, M. POITRINAL, T. TOMITA, S. KITADE, J. MAURICIO, K. OHMORI and S. DE LÉSÉLEUC, “Ultra-Precise Holographic Optical Tweezers Array,” *Phys. Rev. A* **110**, 053518 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevA.110.053518

M. KUNIMI, T. TOMITA, H. KATSURA and Y. KATO, “Proposal for Simulating Quantum Spin Models with the Dzyaloshinskii-Moriya Interaction Using Rydberg Atoms and the Construction of Asymptotic Quantum Many-Body Scar States,” *Phys. Rev. A* **110**, 043312 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevA.110.043312

V. BHARTI, S. SUGAWA, M. KUNIMI, V. S. CHAUHAN, T. P. MAHESH, M. MIZOGUCHI, T. MATSUBARA, T. TOMITA, S. DE LÉSÉLEUC and K. OHMORI, “Strong Spin-Motion Coupling in the Ultrafast Dynamics of Rydberg Atoms,” *Phys. Rev. Lett.* **133**(9), 093405 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevLett.133.093405

X. ZHOU, H. TAMURA, T. H. CHANG and C. L. HUNG, “Trapped Atoms and Superradiance on an Integrated Nanophotonic Microring Circuit,” *Phys. Rev. X* **14**(3), 031004 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevX.14.031004

B-2) 国際会議のプロシーディングス他

C. NILL, S. DE LÉSÉLEUC, C. GROß and I. LESANOVSKY, “Resonant Stroboscopic Rydberg Dressing: Electron-Motion Coupling and Multi-Body Interactions,” *arXiv* 2411.10090 (2024).

K. NISHIMURA, H. SAKAI, T. TOMITA, S. DE LÉSÉLEUC and T. ANDO, “Super-Resolution Holographic Optical Tweezers Array,” *arXiv* 2411.03564 (2024).

T. TOMITA, Y. CHEW, R. VILLELA, T. P. MAHESH, H. SAKAI, K. NISHIMURA, T. ANDO, S. DE LÉSÉLEUC and K. OHMORI, “Atom Camera: Super-Resolution Scanning Microscope of a Light Pattern with a Single Ultracold Atom,” *arXiv* 2410.03241 (2024).

B-3) 総説, 著書

大森賢治, 「量子コンピュータ概観, “巻頭言”」, *表面と真空*, **68(3)**, 127–128 (2025).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

大森賢治, 「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」, ムーンショット目標 6 公開シンポジウム 2025, バルサール秋葉原, 東京都千代田区, 2025 年 3 月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, 応用物理学会超伝導分科会第 70 回研究会「量子コンピュータの現状と展望」, 同志社大学東京オフィス セミナー室, 東京都中央区, 2024 年 12 月.

大森賢治, 「冷却原子の量子コンピュータへの展開」, 量子フォーラムシンポジウム「冷却原子が拓く量子技術の最前線」, 赤坂インターシティコンファレンス 301, 東京都港区, 2024 年 11 月.

大森賢治, 「量子コンピューティングの最新研究開発の状況と今後の展望」, 第 5 回量子コンピューティング EXPO 【秋】, 幕張メッセ, 千葉県千葉市, 2024 年 11 月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, DBJ iHub 量子コンピュータ実現への道, 大手町プレイスホール&カンファレンス 2F ホール A, 東京都千代田区, 2024 年 11 月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, 自然科学研究機構シンポジウム「量子はめぐる」, 一橋大学一橋講堂, 東京都千代田区, 2024 年 10 月.

大森賢治, 「量子力学 100 年の謎と超高速量子コンピュータへの挑戦」, 名古屋大学総長がナビゲートする科学最前線「知の地平線未来への挑戦」, 中日ホール&カンファレンス, 名古屋市中区, 2024 年 10 月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, 令和 6 年度第 3 回量子技術研究会 JATES 科学技術と経済の会, バルサール飯田橋駅前, 東京都千代田区, 2024 年 7 月.

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, Q2B2024 Tokyo サテライトイベント「量子グローバルイノベーション・サミット 東京 2024」, Deloitte Tohmatsu Innovation Park, 東京都千代田区, 2024 年 7 月.*

大森賢治, 「量子力学 100 年の謎と超高速量子コンピュータへの挑戦」, 第 13 回 JACI/GSC シンポジウム, 一橋講堂, 東京都千代田区, 2024 年 6 月.*

大森賢治, 「世界に羽ばたく大森量子コンピュータ・スタートアップいよいよ始動へ 2」, 政策アクション会議, 神戸大学東京六甲クラブ, 東京都千代田区, 2024 年 6 月.

大森賢治, 「量子力学 100 年の謎と超高速量子コンピュータへの挑戦」, 日本表面真空学会特別講演会, 東京大学武田ホール, 東京都文京区, 2024 年 5 月.*

大森賢治, 「量子スピード限界で動作する冷却原子型・超高速量子コンピュータ」, 一般社団法人量子技術による新産業創出協議会 (Q-STAR) 講演会, 分子科学研究所, 愛知県岡崎市, 2024 年 5 月.

大森賢治, 「世界に羽ばたく大森量子コンピュータ・スタートアップいよいよ始動へ」, 政策アクション会議, 神戸大学東京六甲クラブ, 東京都千代田区, 2024 年 4 月.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” CESQ Colloquium, Centre Européen de Sciences Quantiques (CESQ), Strasbourg (France), March 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” SXSW 2025 Quantum Session, South by Southwest (SXSW) Conference & Festivals, Austin Convention Center, Austin (USA), March 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” International Year of Quantum Science and Technology (IYQ)-2025, The Centre for Quantum Engineering, Research and Education (CQuERE), TCG Centres for Research and Education in Science and Technology (TCG CREST), Kolkata (India), February 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” iSAP-Hamamatsu 2024, Invited Lecture and Symposium Chair, International Symposium on Advanced Photonics(iSAP), Okura Act City Hotel, Hamamatsu (Japan), November 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Center for Quantum Dynamics Colloquium, Universität Heidelberg, Heidelberg (Germany), October 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” QUP Colloquium, International Center for Quantum-field Measurement Systems for Studies of the Universe and Particles (QUP), KEK, Tsukuba (Japan), October 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Okinawa School in Physics 2024: Coherent Quantum Dynamics, OIST Seaside House, Okinawa (Japan), September 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” The 14th Japan-US Joint Seminar on Quantum Electronics and Laser Spectroscopy, Stanford University, Stanford, CA (USA), September 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” R. G. Herb Condensed Matter Seminar, Chicago Quantum Exchange, Physics Department 2320 Chamberlin Hall 1150, University of Wisconsin, Madison, WI (USA), July 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Laboratoire Kastler Brossel (LKB) Seminar 2024, Collège de France, Paris (France), June 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Colloquium, Laboratoire Charles Fabry, Institut d'optique, Palaiseau (France), June 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Swiss-Japanese Quantum Symposium 2024, University of Tokyo Yayoi Auditorium, Tokyo (Japan), June 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Colloquium at Stewart Blusson Quantum Matter Institute, University of British Columbia, Vancouver (Canada), May 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” 26th Photonics North 2024, Vancouver Convention & Exhibition Centre, Vancouver (Canada), May 2024.*

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Innsbruck Physics Colloquium, Innsbruck Physics Research Center, Universität Innsbruck, Innsbruck (Germany), April 2024.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum simulation and quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Quantum Simulation of Novel Phenomena with Ultracold Atoms and Molecules, University of Kyoto Panasonic Auditorium, Yukawa Hall, Kyoto (Japan), April 2024.

B-5) 特許出願

登録

特許第 7511839 号, 「量子シミュレータおよび量子シミュレーション方法 (Quantum Simulator and Quantum Simulation Method)」, 酒井寛人 (浜松ホトニクス), 大森賢治 (自然科学研究機構), 安藤太郎 (浜松ホトニクス), シルヴァン ドレゼルック, 富田隆文, 素川靖司 (自然科学研究機構), 大竹良幸, 豊田晴義 (浜松ホトニクス), 2020 年. (登録日 2024 年 6 月 28 日)

特許第 7511838 号, 「量子シミュレータおよび量子シミュレーション方法 (Quantum Simulator and Quantum Simulation Method)」, 酒井寛人 (浜松ホトニクス), 大森賢治 (自然科学研究機構), 安藤太郎 (浜松ホトニクス), シルヴァン ドレゼルック, 富田隆文, 素川靖司 (自然科学研究機構), 大竹良幸, 豊田晴義 (浜松ホトニクス), 2020 年. (登録日 2024 年 6 月 28 日)

WO2025/063038(A1)(PCT), 「レーザー制御装置, 光ピンセット生成システム, レーザー制御方法, 光ピンセット生成方法及びプログラム」, シルヴァン ドレゼルック, 大森賢治, 富田隆文 (自然科学研究機構), 2023 年. (公開日 2025 年 3 月 27 日)

B-6) 受賞, 表彰

TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh, The Dean's Award of the Physical Sciences Graduate School (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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

Center for Quantum Engineering, Research and Education (CQuERE), TCG, CREST (India), Scientific Advisory Board (2021–), 委員長 (2024–).

日本分光学会代議員 (2022–).

欧州研究会議 (European Research Council: ERC, EU) 外部評価者 (2007–).

学会の組織委員等

原子・分子・光科学 (AMO) 討論会プログラム委員 (2003–).

iSAP HAMAMATSU (International Symposium on Advanced Photonics) 組織委員 (2016–), 議長 (2024).

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 (2015–).

文部科学省 科学技術・学術審議会 量子科学技術委員会 主査代理 (2015–2023), 主査 (2023–2025).

文部科学省 研究計画・評価分科会 臨時委員 (2023–2025).

学会誌編集委員

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, IOP, UK, Section Editor for Quantum Technologies (2019–) and Executive Editorial Board (2021–).

競争的資金等の領域長等

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」, 研究代表者 (2018–).

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」,「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」,プロジェクト・マネージャー (PM) (2022-).

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」,「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」,「大規模冷却原子型量子コンピュータプラットフォームの開発および統合」,課題推進者 (PI) (2022-).

文部科学省「先端国際共同研究推進事業 (ASPIRE)」量子技術領域,「冷却原子型量子コンピュータ」,日本側研究代表者 (2024-).

理科教育活動

セミナー講師「夢への挑戦～自然科学研究機構の研究者・職員から学ぶ」岡崎市第1回MIRAI オンラインセミナー (2024). (Sylvain de LÉSÉLEUC)

出前授業「未来の量子ネイティブ×ムーンショット研究者」神奈川県立相模原中等教育学校 (2024). (Sylvain de LÉSÉLEUC, 富田隆文)

ワークショップ「Atomic Qubits: Neutral atoms and Trapped ions」量子コンピュータ関連研究者及び学生の技術交流 大阪大学 (2024). (Sylvain de LÉSÉLEUC, 富田隆文, 牧野 茜)

ワークショップ「ASPIRE, Neutral atom QC Winter Camp 2024」量子コンピュータ関連若手研究者及び学生の技術交流 (2024). (Sylvain de LÉSÉLEUC, 富田隆文, 牧野茜)

その他

大森賢治個人で年額 (換算) およそ 17 億円にも上る極めて高額的外部資金を獲得 (上記の「競争的資金等の領域長等」および下記「B-10) 競争的資金」の項を参照) することで, 分子研の財政に多大な貢献をもたらすとともに, 分子研の世界的な知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

大森が研究代表者 (プロジェクトマネージャー) を務める内閣府・ムーンショット型研究開発プロジェクト「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」が, ムーンショット事業の 2024 年度年次評価において「中性原子量子コンピュータの研究開発で世界トップレベルにあることを, 非常に高く評価する」などと絶賛され, 総合評価において「最高の S 評価」を受けるなど, 量子コンピュータ研究開発で世界のトップを牽引しており, 分子研の世界的な知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

米国ホワイトハウスが公表した日米首脳会談 (ワシントン D.C. 2024 年 4 月 10 日) の公式資料「FACT SHEET」において分子研大森グループの強力な量子コンピュータ開発における日米協力がハイライトされた。これによって分子研の世界的な知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

自然科学研究機構本部と分子科学研究所が中心となり, 分子研大森グループの量子コンピュータ開発の成果を用いた事業化のための協議体「事業化検討プラットフォーム」を立ち上げ, 日本政策投資銀行 (DBJ), 日立製作所, 富士通, NEC, 浜松ホトニクス, 豊田通商, 岡崎信用金庫, 産総研 G-QuAT をはじめとする 13 社・1 国立研究所の参画を得ている。本件は日本経済新聞の朝刊 1 面トップ記事として掲載された。これによって, 国内外の産業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

分子研大森グループによるムーンショット量子コンピュータ開発の最新状況が, 日本経済新聞の朝刊 1 面トップ記事として掲載された。これによって, 国内外のアカデミア・政財界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献.

8-3 情報発信に記載されている通り、過去1年に限っても読売新聞、日本経済新聞、産経新聞、中日新聞、NHK 総合テレビ全国放送などを始めとする全国的な主要ニュースメディアに度々露出している。これらの極めて頻繁な全国区の報道によって、一般社会に対する分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。(web ニュース等については、<https://ohmori.ims.ac.jp/kenjihomori/> を参照)

文部科学省・科学技術・学術審議会・量子科学技術委員会の主査(2023–現在)、主査代理・専門委員(2015–2023)、ならびに文部科学省・研究計画・評価分科会・臨時委員(2023–現在)として、量子テクノロジー開発および分子研 UVSOR を含む量子ビーム(放射光施設・大型レーザー施設)利用推進に関する政策検討に大きく貢献。これによって、日本政府における分子研の知名度・プレゼンス向上に大きく貢献。

冷却原子型・量子コンピュータ開発において従来技術を一気に2桁加速する超高速2量子ビットゲート(量子コンピューティングの心臓部である計算素子)を達成し、Nature Photonics 2022年10月号の表紙を飾るとともに、日米欧中を中心に世界中の200件以上のニュース報道(2022年8月以降～現在も継続)でハイライトされ、この成果に関連して、日経サイエンス7月号(2024年5月24日・雑誌)、日経コンピュータ9月5日号(2024年9月5日・雑誌)にも特集されるなど、関連報道が現在も継続している(ニュース報道については、<https://ohmori.ims.ac.jp/kenjihomori/> を参照)。これらの報道によって分子研の世界的な知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

上記の超高速2量子ビットゲートの成果等、大森ムーンショット量子コンピュータの開発の進展を受けて、日本の学術会議や大型の産業展示会等をはじめ、オーストリアのインスブルック大学、カナダのプリティッシュ・コロンビア大学、フランス・アカデミアの最高峰であるCollege de France、同じくフランスのInstitut d'Optique、ストラスブール大学、米国のスタンフォード大学、ウィスコンシン大学、ドイツのハイデルベルグ大学、インドのTCG CREST、バンクーバーの国際会議Photonics North、米国オースティンで開催された世界最大級の産業展示会・カンファレンスSXSW などから、次々にコロキウムや招待講演に招かれ、世界のアカデミアや産業界で大反響を呼んでおり、分子研の世界的な知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

分子研・大森グループと米国を代表する量子テクノロジー企業であるColdQuanta (現Infleqtion) 社(<https://coldquanta.com>)との間で量子コンピュータ開発における協業を進めており(2022年2月18日–現在)、米国の産業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

インドを代表する新しい研究機関TCG CREST, The Center for Quantum Engineering Research and Education (CQuERE)のScientific Advisory Board メンバー(2021–現在)(2024年よりArtur Ekert 英オックスフォード大教授の後任として委員長に就任)として、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

経産省が進める量子コンピュータ関係のヒアリング(2024年3月14日、8月27日)に、冷却原子型量子コンピュータの代表として貢献することによって、経産省における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

財務省関係者を中心とするシンクタンクである政策アクション会議に招かれ(2024年4月4日、6月6日、12月5日)、政財界の実力者らに向けて、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況や事業化に関するレクチャーを行うとともに、それら実力者らと量子コンピュータ開発の現状と展望および関連政策に関する討論を行うことによって、我が国の政財界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

Q-STAR (一般社団法人量子技術による新産業創出協議会)メンバーが多数分子研に所属し、これに対して大森が、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況と事業化に関するレクチャー(2024年5月20日)を行うことによって、日本の産業界に対する分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

JACI（公益社団法人新化学技術推進協会）シンポジウムに招かれ大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況と事業化に関する基調講演（2024年6月18日）を行うことによって、従来の電気、情報業界を超えて日本の化学業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

世界初の量子超越性の実証（2019年）で有名な John Martinis 教授（UCSB）と彼が新たに立ち上げた米国の量子コンピュータスタートアップ Qolab 社の経営陣主催のコロキウム（2024年7月16日 @ ウィスコンシン大学マディソン）に招かれ大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況と事業化に関するレクチャーを行うことによって、米国の量子コンピュータ業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

世界を代表する量子関連企業である NVIDIA 社、Oxford Quantum Circuits 社、QuEra Computing 社、Strangeworks 社の経営陣や、我が国を代表する量子関連企業の研究開発幹部（富士通、NEC、東芝、日立総合計画研究所、東芝デジタルソリューションズ）が登壇する Q2B 会議のサテライト会議「Quantum Globalization Summit: Tokyo 2024」（2024年7月22日 @ デロイトトーマツ社、東京・丸の内）における唯一の基調講演に招かれ、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況と事業化に関するレクチャーを行うことによって、国際的な量子コンピュータ業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

JATES（一般社団法人科学技術と経済の会）が主催する講演会「量子技術研究会」（2024年7月26日）に大森が招かれ、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況と事業化に関するレクチャーを行うことによって、我が国の産業界や政府関係者（総務省など）に対する分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

文科省研究振興局長ご一行の分子研来所に際して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー（2024年9月17日）を行うことによって、大学共同利用機関法人としての分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

経済産業省ご一行の分子研・大森グループ訪問に際して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー（2024年10月9日）を行うことによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

自然科学研究機構シンポジウム（2024年10月20日）で、大森グループの超高速量子コンピュータに関する招待講演を行うことによって、自然科学研究機構と分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

経済産業省に招かれ（2024年11月5日）、大森グループの超高速量子コンピュータの研究開発状況に関するレクチャーを行うことによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

大森が、浜松ホトニクス社 関連財団である光科学技術研究振興財団が主催する国際会議 第4回 iSAP Hamamatsu（2024年11月11-13日、オークラアクトシティホテル浜松、浜松市）の議長を務めるとともに、招待講演を行った。この会議には、2019年に世界で初めて量子コンピュータの量子超越性を実証した John Martinis 教授（米国・UCSB）をはじめ、Vladan Vuletic 教授（米国・MIT）、Jonathan Home 教授（スイス・ETH Zurich）、Michelle Simmons 教授（オーストラリア・UNSW）、藤井啓祐教授（大阪大学）ら量子コンピュータ分野の世界最高峰の面々が集結した。会議の様子はNHK 総合テレビの「おはよう日本」（全国版）で大きく取り上げられ、大森のインタビュー動画が全国に向けて放映された。これによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

財務省傘下の日本政策投資銀行（DBJ）が主催するシンポジウム「DBJ iHub 量子コンピュータ実現への道」（2024年11月14日、大手町プレイスホール&カンファレンス、東京）において、大森グループの超高速量子コンピュータの研究開発状況に関する招待講演を行うことによって、全国の産業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

2019年に世界で初めて量子コンピュータの量子超越性を実証したJohn Martinis 教授(米国・UCSB)を分子研に招聘し、同教授による分子研コロキウム(2024年11月18日)を主催することによって、分子研の知名度・プレゼンス向上に大きく貢献。

量子コンピューティングEXPO(2024年11月21日、幕張メッセ)で大森グループの超高速量子コンピュータの研究開発状況に関する招待講演、および量子コンピュータ全般に関するパネルディスカッションを行うことによって、全国の産業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

量子フォーラムシンポジウム「冷却原子が拓く量子技術の最前線」(2024年11月27日、赤坂インターシティコンファレンス、東京)で、大森グループの超高速量子コンピュータの研究開発状況に関する招待講演を行うことによって、量子技術関連のアカデミアと産業界における分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

三菱ケミカル社ご一行の分子研・大森グループ訪問に際して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー(2025年1月7日)を行うことによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

日本経済新聞社記者の分子研・大森グループ訪問・取材に際して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー(2025年1月14日)を行うことによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

衆議院議員の分子研・大森グループ訪問に際して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー(2025年1月16日)を行うことによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

文部科学省 研究振興局 量子研究推進室室長ご一行の分子研・大森グループ訪問・取材に際して、大森グループの超高速量子コンピュータの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー(2025年2月17日)を行うことによって、大学共同利用機関法人としての分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

世界最大級のビッグテックカンファレンス／EXPOであるSXSW(2025年3月7-15日、Austin市、Texas州、USA)において、「量子力学100年の謎と大森グループの超高速量子コンピュータの研究開発状況」に関する招待講演を行うことによって、世界中の産業界・マスコミにおける分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

読売新聞 東京本社 記者の分子研・大森グループ訪問・取材に際して、大森グループの超高速量子シミュレータ・量子コンピュータラボの研究開発状況に関するレクチャーおよびラボツアー(2025年3月19日)を行うことによって、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

公益社団法人 日本表面真空学会からの依頼で、同学会の会誌「表面と真空」第68巻3月号(特集「量子コンピュータの最前線」)の巻頭言を執筆することによって、大学共同利用機関法人としての分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

「欧州研究会議(European Research Council: ERC)」や量子コンピュータ研究開発コンソーシアム「ミュンヘン量子バレー(Munich Quantum Valley: MQV)」などヨーロッパを代表する研究開発助成機関から量子技術関係の数々の大型研究プロポーザルの審査を依頼されるなど、世界的な科学研究コミュニティから大きな信頼を集めており、分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

B-8) 大学等での講義, 客員

Heidelberg University (ドイツ), 客員教授 (フンボルト賞受賞者), 2012年–.

総合研究大学院大学先端学術院, 集中講義「量子動力学」, 2024年.

総合研究大学院大学先端学術院, 集中講義「量子動力学」, 2024年. (富田隆文)

B-9) 学位授与

TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh, “Ultrafast excitation of atoms to a Rydberg orbit using picosecond pulsed lasers,” 2025年3月, 博士 (理学).

B-10) 競争的資金

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」, 「大規模・高コヒーレンスな動的原子アレー型・誤り耐性量子コンピュータ」, 大森賢治 (2022年度–2030年度).

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」, 「大規模冷却原子型量子コンピュータプラットフォームの開発および結合」, 大森賢治 (2022年度–2030年度).

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」, 「Novel techniques and tools for high-fidelity operation of a cold-atom based, fault-tolerant, quantum computer」, Sylvain de LÉSELEUC (2022年度–2030年度).

内閣府「ムーンショット型研究開発制度」, 「高忠実度ゲート操作および誤り訂正のための光学的・量子制御技術の開発」, 富田隆文 (2022年度–2030年度).

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年度–2028年度).

文部科学省 先端国際共同研究推進事業 (ASPIRE) 量子技術領域, 「冷却原子型量子コンピュータ」, 大森賢治 (日本側・研究代表者) (2024年度–2029年度).

B-11) 産学連携

共同研究, キュエル (株), 「量子コンピュータの制御」, 大森賢治 (2024年度–).

共同研究, 浜松ホトニクス (株), 「高精度光技術を用いた量子シミュレータの研究」, 大森賢治 (2016年–).

共同研究, (株) 日立製作所, 「動的量子ビットを用いた量子コンピュータの研究」, 大森賢治 (2023年度–).

共同研究, ColdQuanta, Inc. d.b.a. Infleqtion (米国), 「超高速量子コンピュータの開発」, 大森賢治 (2023年度–).

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5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原子・分子ベースの量子情報科学の開拓：アト秒精度の超高速コヒーレント制御技術によって、原子・分子内の電子・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確立を目指す。さらに、単一原子・分子の操作・読み出し技術の開発を進める。
- ④超高速量子シミュレータの開発：ほぼ絶対零度（～50 ナノケルビン）まで冷やした極低温のルビジウム原子をミクロンレベルで整列させた人工原子結晶とアト秒精度の超高速コヒーレント制御技術を組み合わせた世界唯一・最速の「超高速量子シミュレータ」のさらなる高機能化を目指す。
- ⑤超高速量子コンピュータの開発：極低温のルビジウム原子をミクロンレベルで整列させた人工原子結晶とアト秒精度の超高速コヒーレント制御技術を組み合わせた世界唯一・最速の「超高速量子コンピュータ」の開発を進める。

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

解良 聡（教授）（2014 年 4 月 1 日着任）

福谷 圭祐（助教）

下ヶ橋 龍之介（特任助教）

中澤 遼太郎（特任研究員）

WONGKANYA, Ratchada（インターンシップ）

西野 史（大学院生）

PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela（大学院生）

神谷 美穂（事務支援員）

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) 配向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
- c) 有機半導体薄膜の電荷輸送機構の研究
- d) 有機半導体薄膜の界面電子準位接合機構の研究
- e) 自己組織構造体の作製と分子機能の分光研究
- f) 機能性分子薄膜の振動状態と電子励起計測
- g) 低次元電子相関物質の物性機構解明

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。超短パルスレーザー光を励起源とする二光子光電子分光装置を構築し、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進めている。UVSOR では BL7U における低エネルギー励起光を用いた角度分解光電子分光（ARPES）による分子界面電子状態の計測法開拓を推進しつつ、BL6U における光電子運動量顕微鏡（PMM）の装置開発と分子系への最適化のためのパラメータ調整を進めている。
- b) 高配向分子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、有機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きた。その後、高配向試料では広波数空間二次元分解測定が分子軌道の可視化に対応することが指摘され、新たな量子計測ツールになりうると期待されている。前述の放射光を利用した PMM 装置による高効率計測が強力である。特に単層膜界面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定量化し、局在電子系における一電子近似の限界を吟味しつつ、弱相互作用系の物理現象を議論するための新たな方法論の構築を目指している。
- c) 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する技術確立した。分子間相互作用の大きさ、ホール有効質量、バンド伝導移動度の定量的評価と、分子結晶特有の物理モデルの構築を進めている。多体効果による電子構造への影響を検出し、非自明な機能開拓へ向けた研究を進めている。

有機半導体結晶における振電相互作用の運動量異方性の検出に成功した。

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、準粒子描像に基づいた輸送機構の解明を目指している。

- d) 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。極めて高効率に光電子を捕捉し評価可能な高感度紫外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。また低エネルギー逆光電子分光装置の導入により、伝導帯構造を合わせて評価することが可能となり、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。レーザー励起光によるギャップ状態密度の評価を開始した。
- e) 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により発現する各種機能の解明を目指す。新規な共有結合性有機構造体の作製、自己組織化や原子・分子捕獲などによる有機無機複合構造体の作製に挑戦している。各種分子機能の起源について解明するため、電子状態の局在性の視点で構造との相関を各種先端分光法を駆使して研究を進めている。2022 年度より、キラル分子によるスピン選択性の定量的電子構造評価に向けた高配向キラル二次元膜の研究を開始した。分子薄膜や低次元物質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), 高分解能スポット解析型低速電子線回折 (SPALED), 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。
- f) 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。国際共同による二次元検出器を利用したフォノン分散実験を進めている。
- g) 電子が物質中の様々な準粒子と相互作用することにより発現する特異物性はその複雑性・多様性から根本起源が未解明であるものが多い。レーザー励起 ARPES, 二次元 ARPES や PMM 法などの電子と準粒子の直接観測を可能とする分光法を用いて、主に励起子絶縁体や電荷密度波物質の電子物性の解明・制御を目指した研究プロジェクトの立ち上げを行なっている。

B-1) 学術論文

F. NISHINO, K. FUKUTANI, J. BRANDHOFF, M. GRUENEWALD, E. FUERCH, M. SCHAAL, F. OTTO, D. STELTER, R. FORKER, Z. ZHANG, T. HIROSE, T. FRITZ and S. KERA, “Enantiospecific Mirror-Imaged Growth in Overlayers of Enantiopure Thiadiazole-[9]helicene on Au(111) without Commensurability,” *Appl. Phys. Express* **18**(1), 015502 (2025). DOI: 10.35848/1882-0786/ada688

F. MATSUI, K. HAGIWARA, Y. SATO, E. NAKAMURA, R. SAGEHASHI, S. KERA and S. SUGA, “Dual-Beamline Photoelectron Momentum Microscopy for Valence Orbital Characterization,” *Synchrotron Radiat. News* **37**(4), 43–48 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2391256

S. LEE, K.-H. JIN, K. FUKUTANI, J. LEE, C. I. KWON, J. S. KIM, J. KIM and H. W. YEOM, “Surface Doping and Dual Nature of the Band Gap in Excitonic Insulator Ta₂NiSe₅,” *ACS Nano* **18**(36), 24784 (2024). DOI: 10.1021/acsnano.4c02784

J. P. ITHIKKAL, K. FUKUTANI, F. NISHINO, T. MINATO, H. ISHII, S. IZAWA, K. TANAKA, M. HIRAMOTO and S. KERA, “Direct Observation of the Electronic Structure and Many-Body Interactions of Low-Mobility Carriers in Perylene Diimide Derivative,” *Appl. Phys. Lett.* **125(5)**, 052102 (2024). DOI: 10.1063/5.0221293

K. HAGIWARA, E. NAKAMURA, S. MAKITA, S. SUGA, S. TANAKA, S. KERA and F. MATSUI, “Development of Dual-Beamline Photoelectron Momentum Microscopy for Valence Orbital Analysis,” *J. Synchrotron Radiat.* **31(Pt3)**, 540–546 (2024). DOI: 10.1107/s1600577524002406

T. YAMADA, R. NEMOTO, F. NISHINO, T. HOSOKAI, C. H. WANG, M. HORIE, Y. HASEGAWA, S. KERA and P. KRÜGER, “On-Surface Growth of Transition-Metal Cobalt Nanoclusters Using a 2D Crown-Ether Array,” *J. Mater. Chem. C* **12(3)**, 874–883 (2023). DOI: 10.1039/d3tc03339b

B-3) 総説, 著書

S. KERA, T. ARAKI, K. TANAKA, Y. TAIRA, M. KATOH and F. MATSUI, “UVSOR Synchrotron Facility 40th Anniversary,” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 41–42 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330876

B-4) 招待講演

解良 聡, 「有機材料の光電子分光計測：電子状態の次元階層性の特徴」, 第 19 回有機デバイス・物性院生研究会, 京都, 2024 年 10 月.

S. KERA, “Insight into the charge transport mechanisms of molecular crystals,” Nanyang Technological University, Singapore (Singapore), July 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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–).

AOF (Asia Oceania Forum for Synchrotron Radiation Research) アジア・オセアニア放射光研究評議会庶務委員 (2021–).

日本放射光学会評議員 (2024–2026).

学会の組織委員等

第 37 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム 組織委員会委員 (2024–2025).

VSX・SX 高輝度光源利用者懇談会会長 (2024–2026).

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 ユーザー協同体 (SPRUC) 機関代表者 (2019–).

KEK 物質構造科学研究所運営会議委員 (2024–2027).

東京大学物性研究所附属極限コヒーレント光科学研究センター軌道放射物性研究施設運営委員会委員 (2022–2026).

科学技術交流財団あいちシンクロトロン光センター運営委員会委員 (2023–2025).

量子科学技術研究開発機構 NanoTerasu 共用ビームライン整備検討委員会委員 (2023–).

B-8) 大学等での講義, 客員

東北大学大学院理学研究科, 委嘱教授, 「強相関電子物理学特論」, 2020年4月–.

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-9) 学位授与

PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela, “Material design for lateral organic solar cells by studying semiconductor electronic properties,” 2024年9月, 博士(理学).

西野 史, 「キラル分子による表面对称性の操作と電子物性への影響」, 2025年3月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(S), 「階層的準粒子の先端計測による可知化と分子材料研究の変革」, 解良 聡 (2023年度–2027年度).

科研費基盤研究(C), 「基底状態観測と物質設計に基づく定常励起子の制御」, 福谷圭祐 (2022年度–2024年度).

科研費研究活動スタート支援, 「半導体電気物性の起源: ギャップ内のppm オーダー低状態密度の定量観察と全容解明」, 中澤遼太郎 (2024年度–2025年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 東ソー(株), 「電荷輸送材料の薄膜状態における電子状態の解析」, 解良 聡 (2024年度).

共同研究, 三菱ケミカル(株), 「軟X線共鳴散乱を用いた樹脂素材の元素選択的な構造解析法の開発」, 解良 聡 (2023年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

機能性分子の高配向試料作製法と精密電子状態計測で蓄積したノウハウを集結し, 分子集合体における「電子の真の姿を可知化」することでその機能・物性の根源を理解することを主眼とし, 様々な放射光利用先端分光法や独自に開発した分光装置群を駆使して多角的に研究を進めている。2021年度に福谷助教が着任し, 低次元物性と精密計測に関する研究力を強化した。分子結晶や界面の階層性に着目し, 電子物性の多体効果問題に挑戦する。一方, UVSOR 施設長として国内コミュニティの基盤強化を推進するための利用支援に注力している。2019年度から技術開発を進めているPMM装置について, スピン検出機能追加による第二期R&Dを開始した。松井教授らと共に多彩な計測機能をもつ複合システムの完成を目指す。ドイツの装置開発拠点であるユーリッヒ研究所との学術協定によって, 装置開発とその利用展開についての国際共同研究を推進するとともに, 国内では分子固体系のオールジャパン体制(実験班, 理論班)を構築し, 戦略的に上記装置を利用した新奇実験を牽引する。下ヶ橋特任助教ならびに中澤研究員の若手2名を雇用し, 科研費基盤(S) 課題による研究推進を強化した。施設長期計画として次世代研究施設UVSOR-IVの建設に向けた準備を多面的に進めている。国内外施設およびコミュニティの意見交換と情報収集に邁進している。

長坂 将成（助教）（2007 年 4 月 1 日着任）

神谷 美穂（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，軟X線分光学

A-2) 研究課題：

- a) 軟X線吸収分光法による溶液の局所構造解析
- b) 溶液中の金属錯体の金属－配位子間の非局在化の解明
- c) 大規模な分子系の構造解析のための内殻励起計算法の開発
- d) 時間分解軟X線吸収分光法によるエネルギー・電子移動のオペランド計測

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 2 keV 以下の軟X線領域には炭素，窒素，酸素の K 吸収端や遷移金属の $L_{2,3}$ 吸収端が存在するため，軟X線吸収分光（XAS）法は溶液の局所構造を元素選択的に調べることができる有用な手法である。我々は液体層の精密厚さ制御法（20 nm～40 μ m）を独自に開発することで，溶液の XAS 測定を実現した。更に，XAS スペクトルのエネルギーシフトの高精度測定と量子化学に基づく内殻励起計算から，異なる元素ごとに溶液中の分子間相互作用を調べる手法を確立した。最近では，小さな分子だけでなく，溶液中の高分子の XAS 計測を実現した。これにより，純水と純メタノールには溶ける高分子が，メタノール水溶液中では溶けなくなる共貧性溶媒効果のメカニズムを，高分子の C=O 基の酸素 K 吸収端 XAS 計測により明らかにした。
- b) 水溶液中のポルフィリン金属錯体の金属－配位子間の非局在化を，中心金属の $L_{2,3}$ 吸収端と配位子の窒素 K 吸収端の XAS 計測により明らかにした。配位子の窒素 K 吸収端を用いることで，金属－配位子間の非局在化の中心金属依存性を調べた。また，水溶液中で配位構造の分かっていないポルフィリンコバルト錯体の窒素 K 吸収端 XAS 計測と様々な配位モデルの内殻励起計算から，水溶液中においてポルフィリンコバルト錯体に溶媒の水は配位しないで，5 配位構造を維持することを明らかにした。
- c) XAS 計測から溶液中の高分子や生体分子の構造を調べるには，大規模な分子系の内殻励起計算法を確立する必要がある。そこで，分子動力学計算により得た分子配置から，励起分子とその周りの分子を切り出して，内殻励起計算するスキームを確立した。これにより，液体エタノールの炭素 K 吸収端 XAS スペクトルが，実験で得られたスペクトル形状を良く再現することを確かめた。また，アセトニトリル水溶液の酸素 K 吸収端 XAS スペクトルで得られたシャープなピークが，アセトニトリル中に孤立して存在する水分子に由来することを明らかにした。更に，高分子の鎖の一部を切り出して，内殻励起計算を行う方法論の開発を行った。
- d) 超高速レーザーと放射光から発生する軟X線パルスを 70 ps の時間分解能で同期するシステムを構築して，溶液光化学反応のオペランド XAS 測定を実現した。これにより，フェナントロリン鉄錯体水溶液の窒素 K 吸収端 XAS スペクトルにおいて，光励起後の高スピン状態から低スピン状態に緩和する過程の経時変化を，金属錯体の配位子の電子状態変化から観測することに成功した。また，XAS の吸収端の違いによる緩和時間の変化や，緩和時間の溶媒依存性と温度依存性についても明らかにした。現在，異種金属錯体間での蛍光共鳴エネルギー移動や，二元分子系における光電子移動の機構解明に，時間分解 XAS 法を適用するための実験条件の検討を行っている。

B-1) 学術論文

T. MIBU, R. MATSUOKA, M. NAGASAKA and T. KUSAMOTO, “Emission Enhancement in a Luminescent Polychlorinated Diphenylpyridylmethyl Radical through Coordination to Silver(I),” *Dalton Trans.* **54(6)**, 2265–2270 (2025). DOI: 10.1039/D4DT03129F

M. NAGASAKA, Y. YAO and K. MOCHIZUKI, “Oxygen K-Edge Inner-Shell Calculations of Polymers in Solutions Realized by the Extraction of Local Structures from Molecular Dynamics Simulations,” *J. Chem. Phys.* **162(5)**, 054901 (2025). DOI: 10.1063/5.0245456

M. NAGASAKA, S. TSURU and Y. YAMADA, “Metal–Ligand Delocalization of Iron and Cobalt Porphyrin Complexes in Aqueous Solutions Probed by Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26(36)**, 23636–23645 (2024). DOI: 10.1039/D4CP02140A

Y. YAO, M. NAGASAKA and K. MOCHIZUKI, “Salt-Specific Effect on the Solubility and Aggregation of 1-Butanol in Water,” *Phys. A* **647**, 129917 (2024). DOI: 10.1016/j.physa.2024.129917

M. NAGASAKA, “Probing Isolated Water Molecules in Aqueous Acetonitrile Solutions Using Oxygen K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. Lett.* **15(19)**, 5165–5170 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.4c01087

M. NAGASAKA, F. KUMAKI, Y. YAO, J. ADACHI and K. MOCHIZUKI, “Mechanism of Poly(*N*-isopropylacrylamide) Cononsolvency in Aqueous Methanol Solutions Explored via Oxygen K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26(18)**, 13634–13638 (2024). DOI: 10.1039/D4CP00676C

B-3) 総説, 著書

工藤優斗, 熊木文俊, 長坂将成, 足立純一, 野口良史, 古賀伸明, 板橋英之, 樋山みやび, 「ホタル生物発光における内殻吸収計測技術」, *Photon Factory News*, **42(4)**, 15–20 (2025).

熊木文俊, 長坂将成, 深谷 亮, 足立純一, 「溶液試料の光励起緩和過程の研究に向けた時間分解軟X線吸収分光法の開発」, *しょうとつ*, **22(1)**, R001 (2025). DOI: 10.50847/collision.22.R001

長坂将成, 「軟X線吸収分光法による高分子溶液の共貧性溶媒効果の解明」, *月刊機能材料*, **44(10)**, 41–47 (2024).

B-4) 招待講演

長坂将成, 「軟X線吸収分光測定のための液体セルの開発」, 第24回R&Dビームライン検討会, オンライン講演会, 2024年10月.

長坂将成, 「溶液の軟X線吸収分光計測の現状と将来展望」, 物理化学と放射光・先端計測に関する研究会, 岡崎, 2024年10月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第2回PF-UAサマースクール「放射光の特長を活かした分析手法」実行委員長 (2024).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

PF User Association 教育担当幹事 (2024–2027).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「人工光合成をめざす半導体光触媒：オペランド計測によるミリ秒反応化学の解明」(代表：大西 洋),長坂将成(研究分担者)(2022年度-2024年度).

科研費基盤研究(B),「難分解性有機物資源化を可能にするグラファイト担持型超強力酸化触媒活性種の開発」(代表：山田泰之),長坂将成(研究分担者)(2022年度-2024年度).

光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

加藤 政博（特任教授（クロスアポイントメント*））（2019 年 4 月 1 日着任）

石原 麻由美（事務支援員）

加茂 恭子（事務支援員）

横田 光代（事務支援員）

*広島大学放射光科学研究所

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。UVSOR の将来計画に関する設計研究に着手し，既存加速器の更なる高度化の可能性を検討した後，新しい光源加速器の設計を開始し，これまでに電子エネルギー 1 GeV，周長約 70 m の放射光源の基礎設計を完了した。高エネルギー加速器研究機構などと連携し，持続可能な加速器の実現を目指して加速器要素技術の開発を進めている。
- b) 自由電子レーザーや関連技術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。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。
- c) 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，広島大学や室蘭工業大学と協力し，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進めた。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た。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。

- e) アンジュレータ放射光波束の時間構造に着目した研究に原子分子物理学研究者と共同で取り組み、2連のアンジュレータからの自然放射を用いた孤立原子の量子状態制御に世界で初めて成功した。放射光の時間構造や干渉性の実験的検証を進めた他、単一電子からの放射の観測など、全く新しい放射光利用法の開拓に向けた実験研究を進めている。

B-1) 学術論文

M. KATOH, M. FUJIMOTO, E. SALEHI, M. HOSAKA and H. KAWAGUCHI, “Chirality in Electromagnetic Radiation from Relativistic Electrons,” *Chirality* **36**(5), e23677 (2024). DOI: 10.1002/chir.23677

M. KOBAYASHI, S. YOSHIMURA, H. IWAYAMA, N. KONDO, J. TAKAHASHI, H. OTA, M. KATOH, K. KOBAYASHI and H. NAKAMURA, “First Attempt at Photoionized Plasma Production with VUV Radiation in Synchrotron Light Source UVSOR-III,” *Plasma Fusion Res.* **19**, 1301028 (2024). DOI: 10.1585/pfr.19.1301028

M. KOBAYASHI, J. TAKAHASHI, H. OTA, K. MATSUO, M.I.A. IBRAHIM, T. MINATO, G. FUJIMORI, M. KATOH, K. KOBAYASHI, Y. KEBUKAWA and H. NAKAMURA, “Emergence of Optical Activity and Surface Morphology Changes in Racemic Amino Acid Films under Circularly Polarized Lyman- α Light Irradiation,” *Chirality* **36**, e70004 (2024). DOI: 10.1002/chir.70004

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 (2020–).

日本放射光学会評議員 (2022–).

文部科学省、学術振興会、大学共同利用機関等の委員等

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–).

B-8) 大学等での講義、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

科研費挑戦的研究(萌芽), 「広帯域インコヒーレント放射光の可干渉性を利用する革新的光技術の探索」, 加藤政博 (2022年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR は 2000 年以降の継続的な高度化により、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が、国内外では新しい光源の建設稼働が相次ぎ、更なる競争力の向上が求められている。現在の加速器の更なる高度化の可能性を検討した結果、現在の性能を大幅に上回る高度化改造は困難であると結論づけ、新規に回折限界を目指す光源加速器の建設について検討を進めた。高エネルギー加速器研究機構や名古屋大学シンクロtron光研究センター、広島大学放射光科学研究所などと連携し、持続可能な加速器施設を目指した省エネルギー化や運

転の自動化などを念頭に、次期光源に必要とされるハードウェア技術開発を進めている。

高エネルギー自由電子を用いた光発生として、自由電子レーザーやレーザーコンプトン散乱ガンマ線、コヒーレントシンクロトロン放射の発生法の開発や高度化、それらの利用法の開拓に取り組んできた。最近では光子の時空間構造やその干渉性の実験的検証やその利用法の開拓に挑戦している。放射光による光渦の生成、さらに放射光光渦同士の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ができた。また、二連アンジュレータから放射される光子の時間構造を利用した量子状態制御について先駆的な成果が出ている。最近では、単一電子からの電磁放射に関する基礎研究にも着手した。相対論的自由電子からの電磁放射の時空間構造の制御とその応用というこれまで全く着目されていなかった領域を切り拓きつつあり、引き続き基礎研究を進めるとともに幅広く応用展開の可能性を探っていきたい。

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

平 義隆（准教授）（2020 年 4 月 1 日着任）

脇田 幸哉（特別共同利用研究員）

YANG, Yuxuan（特別共同利用研究員）

ZHOU, Weixin（特別共同利用研究員）

石原 麻由美（事務支援員）

加茂 恭子（事務支援員）

横田 光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：ガンマ線計測，陽電子計測，光渦計測

A-2) 研究課題：

- a) 超短パルスガンマ線の発生と利用研究
- b) 軸対称偏光レーザーを用いたガンマ線の発生と計測技術開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 世界の放射光施設でも UVSOR の独自技術である超短パルスガンマ線を用いた陽電子消滅分光法によるバルク材料の原子スケール欠陥分析に関する研究である。超短パルスガンマ線は、フェムト秒レーザーと 750MeV 電子ビームの 90 度衝突逆トムソン散乱によって発生し、そのパルス幅はサブピコ秒からピコ秒オーダーである。この超短パルス性とバックグラウンドの低さを活かしたガンマ線の利用研究として、陽電子消滅分光法による材料中の欠陥分析をユーザーに提供している。陽電子は、対生成と呼ばれる現象によって材料内部でガンマ線から発生し、材料中の欠陥に捕獲される。欠陥の大きさによって陽電子の寿命が変化するために、陽電子寿命を測定することで材料中の欠陥を非破壊で分析することができる。さらに、ガンマ線は物質に対する透過率が高いために厚さ数 cm のバルク材料の欠陥分析を行うことが可能である。陽電子寿命測定法のユーザー利用が現在行われており、放射性同位元素から発生する陽電子を直接試料に照射する従来の方法では実施困難な金属材料の応力負荷及び水素脆化時の欠陥形成のその場測定手法の開発を進めている。応力負荷時の測定については論文の執筆を開始している。

逆トムソン散乱では、偏光レーザーを使うことで偏光ガンマ線が発生する。エネルギー広がり準単色かつエネルギー可変の偏光ガンマ線を発生する唯一の方法であるため、偏光ガンマ線検出器の応答測定にも利用されている。J-PARC において中性子捕獲反応によって発生する円偏光ガンマ線を測定することで、原子核の励起状態のスピンやパリティを決定するための実験が行われている。ガンマ線の偏光計として使用される電磁石を UVSOR に持ち込み、円偏光ガンマ線に対する偏光計の感度測定が行われた。開発している偏光計が、円偏光ガンマ線に対して予想値とほぼ一致する感度が得られている事を確認した。この偏光計を J-PARC 物質・生命科学実験施設の ANNRI ビームラインに設置し、中性子捕獲反応によって発生する円偏光ガンマ線の測定が行われている。この実験に関するユーザー執筆の論文が *Eur. Phys. J. A* に掲載された。

- b) 本研究課題では、特殊な偏光状態であるラジアル偏光やアジマス偏光の軸対称偏光レーザーを用いた逆トムソン散乱によって発生するガンマ線の偏光分布を明らかにする。直線偏光及び円偏光レーザーを用いると、直線偏光及び円偏光のガンマ線が発生する事は既に実験的に確かめられているが、軸対称偏光レーザーを使用した場合にどのよ

うな偏光状態のガンマ線が発生するのは理論的にも実験的にも確認されていない。新しい偏光特性をもつガンマ線を発生出来れば、新たな利用開拓に繋がる可能性がある。軸対称偏光レーザーは、Altechna社のS-waveplateを用いて直線偏光のレーザーから変換する。最初の実験として、ガンマ線の空間分布を2次元検出器(AdvaPIX TPX3)で測定した。軸対称偏光レーザーを用いると、直線偏光及び円偏光のガンマ線とは異なる空間分布になることが確認された。この結果に関する論文が *Phys. Rev. A* に掲載された。

ガンマ線の空間偏光分布を測定するため、偏光計の設計および構築を行った。ガンマ線が直線偏光の場合、ターゲットで散乱されるコンプトン散乱ガンマ線の断面積が方位角方向に変化するため、ガンマ線の偏光軸に対して90度方向に散乱されるガンマ線の割合が高くなる。そのため、ガンマ線検出器を方位角方向に複数配置し、散乱ガンマ線の方位角分布を測定する事でガンマ線の偏光軸を測定できる。また、直径10 mm程度に広がったガンマ線の一部を直径1 mmの鉛コリメータを用いて切り出してターゲットに照射することでその位置での偏光軸を測定できる。さらに、コリメータを2次元スキャンして同様の測定を行う事で、ガンマ線の空間偏光分布を測定できる。実験に向けて、最初に偏光計の設計を行った。放射線シミュレーションコードを用いてガンマ線検出器の選定、ターゲット形状や配置および計数率の計算を行った。検出器固定治具の設計および組立は装置開発室に依頼した。

最初に、偏光特性の分かっている直線偏光および円偏光ガンマ線の空間偏光分布を測定した。理論計算が示すように、ガンマ線ビーム断面の位置によってガンマ線の偏光軸が変化することを測定することができた。今後、軸対称偏光レーザーを用いて発生するガンマ線の空間偏光分布を測定し、その偏光特性を明らかにする。

B-1) 学術論文

R. SATO, M. HAMDAN, K. SHIMAZOE, M. UENOMACHI and Y. TAIRA, “Measurement of Scattering Azimuthal Distribution of Polarized Gamma-Rays in Compton Scattering Using GAGG(Ce) Scintillator,” *J. Instrum.* **20(2)**, C02007 (2025). DOI: 10.1088/1748-0221/20/02/C02007

Y. TAIRA, “Spatial Distribution of Gamma Rays Produced by Axially Symmetric Polarized and Optical Vortex Lasers,” *Phys. Rev. A* **110(10)**, 043525 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevA.110.043525

S. ENDO, R. ABE, H. FUJIOKA, T. INO, O. IWAMOTO, N. IWAMOTO, S. KAWAMURA, A. KIMURA, M. KITAGUCHI, R. KOBAYASHI, S. NAKAMURA, T. OKU, T. OKUDAIRA, M. OKUIZUMI, M. OMER, G. ROVIRA, T. SHIMA, H. M. SHIMIZU, T. SHIZUMA, Y. TAIRA, S. TAKADA, S. TAKAHASHI, H. YOSHIKAWA, T. YOSHIOKA and H. ZEN, “Circular Polarization Measurement for Individual Gamma Rays in Capture Reactions with Intense Pulsed Neutrons,” *Eur. Phys. J. A* **60(8)**, 166 (2024). DOI: 10.1140/epja/s10050-024-01392-6

B-3) 総説, 著書

S. KERA, T. ARAKI, K. TANAKA, Y. TAIRA, M. KATOH and F. MATSUI, “UVSOR Synchrotron Facility 40th Anniversary,” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 41–42 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330876

B-4) 招待講演

平 義隆, 「超短パルスガンマ線の発生と利用研究」, RARiS研究会「加速器を用いたガンマ線ビームの生成, 基礎科学と産業分野への利用」, 仙台, 2024年9月.

平 義隆, 「UVSORにおけるガンマ線源の開発と利用」, 第664回高崎研オープンセミナー, 高崎, 2024年5月.

Y. TAIRA, “Gamma-ray-induced positron annihilation spectroscopy at UVSOR,” 13th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry (PPC-13), Kanazawa, November 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

ビーム物理研究会 若手の会 幹事 (2020–).

日本加速器学会第 21 回年会組織委員 (2024).

学会誌編集委員

日本陽電子科学学会会報編集委員 (2024–2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2018 年 9 月–.

総合研究大学院大学先端学術院, 「放射光科学」, 2024 年 7 月–8 月.

C) 研究活動の課題と展望

陽電子消滅分光法に関しては, 陽電子寿命測定法と寿命運動量相関測定法に加えて, 同時計数ドップラー拡がり法やスピン偏極陽電子の発生と計測技術開発を行い, 分析技術の拡充を図る。計算上はパルス幅数ピコ秒のガンマ線が発生していると考えられるが, 超短パルスガンマ線のパルス幅計測手法の開発も行う。軸対称偏光レーザーを用いたガンマ線発生に関しては, ガンマ線の偏光分布の測定技術を開発する。

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

松井 文彦（主任研究員）（2018年4月1日～2021年11月15日）
（教授）（2021年11月16日昇任）

佐藤 祐輔（助教）
萩原 健太（特任研究員（IMS フェロー））
松田 博之（特任研究員）
大門 寛（研究員）
佐々葉 遼平（特別共同利用研究員）
石原 麻由美（事務支援員）
加茂 恭子（事務支援員）
横田 光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面物性物理学，電子分光計測技術，放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) 電子分光装置・マルチモーダルスピン分析器の新規開発を突破口とした UVSOR の高度化
- b) 運動量分解光電子分光による相転移やスピン物性など新規現象を基盤とした測定手法確立
- c) 新奇表面電子物性・化学特性・スピン科学の応用展開
- d) 諸分光手法の融合による電子状態計測データベース構築と利用コミュニティの開拓

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ① UVSOR オリジナルの Photoelectron Momentum Microscope (PMM) 拠点構築を主務とする。PMM 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。電子物性研究に適した 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装する PMM の導入を実現し、論文・プレスリリースを通じて成果発信を続けている。②並行して全天球電子レンズ及び電子エネルギー・スピン分析器を考案し国際特許出願した。上記の PMM は $3 \text{ \AA}^{-1}$ までの波数空間の一括測定ができるため価電子帯研究で有効な運動エネルギー 36 eV 以下の領域では全天球をカバーすることができるが、原子配列を研究するのに有効な運動エネルギー 500 eV 以上の領域ではせいぜい 15° の領域でしかない。新規分析器は 2 keV でも全天球の放出光電子を取り込むことができ（こちらは特許が2件成立した）、後段のスピン偏向器でスピンの3次元ベクトル解析ができるようになる。①は high-end 型価電子帯光電子分光装置、②は内殻光電子ホログラフィー測定装置である。両者を融合させ、スピン3次元ベクトル解析を実・逆空間で自在にマッピングできる唯一無二の装置を構築する。
- b) 物性評価に適した光波長帯の連続的なエネルギー可変性が UVSOR 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。③分子科学で重要となる CNO 吸収端の光を用い、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。特に、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。共鳴 Auger 電子スペクトルに価電子帯分散が重なる現象の発見は重要である。グラフェンから π 共役系分子への展開に歩を進め、お家芸としての共鳴光電子回折法を確立した。当グループで確立した「運動量分解光電子顕微鏡法」はグラファイトの単原子層ステッ

プの可視化で威力を発揮し、プレスリリースを行った。表面の劈開や分子吸着のエネルギーに関する詳細な議論ができるようになった。④光エネルギー可変性を活かした k_z 分散測定による全 Brillouin 域価電子帯分散マッピングや偏光特性を活かした原子軌道波動関数解析技術は BL6U での共同研究推進の基盤であるが、さらに精緻な測定を行い、表面特有の電子状態や現象の情報を引き出す研究展開を進めている。

- c) BL7U は真空紫外領域 (6–40 eV) をカバーする偏光可変ビームラインである。ブランチ化を行い、新たに PMM に直入射配置で導入することに成功した。軟 X 線の照射位置と同じ場所で真空紫外光による全立体角光電子分光を行うことができる。特にバンドを構成する原子軌道の対称性を直接的に解析することができる新しい手法の展開が始まった。二つのアンジュレータ光源を駆使する包括的な光電子分光ステーションの構築が実現した。この直入射配置を活用した PMM 展開 (*J. Synchrotron Radiat.* 2024 プレスリリース済) をもとに、高対称の光励起実験が可能となり、価電子帯を構成する原子軌道の情報が得られること、および解析で問題となる散乱現象の見分け方を早速実証実験で示すことに成功した。念願の多次元スピン分析解析機能が立ち上がり、基礎データの取得を系統的に進めている段階である。直入射配置と組み合わせたスピン分析は唯一無二の手法となる。
- d) 光電子回折・分光を用いて典型的な高温超伝導体 Bi2212 や代表的層状物質 TaSe₂, TiSe₂ の相転移前後の電子状態をとらえた。graphite 表面の単原子ステップの顕微像の撮影に成功した (*Phys. Rev. B* 2022) は大きな前進である。新たに確立した顕微 ARPES/ARPES 顕微法の論文 (*J. Phys. Soc. Jpn.* 2022) および (*Rev. Sci. Instrum.* 2023) は両方とも Editor's Choice に選定された。劈開試料表面の局所部分の精密分析の成功は今後の共同研究を呼び込む重要な成果である。共同研究先から Ir 単結晶薄膜の電子状態評価の依頼を受け、バンド分散の測定に成功した。この薄膜は新しいスピン 2 次元フィルターとして有望な材料であり、上記で述べたスピン 3 次元ベクトル解析への応用展開につながるものである。

B-1) 学術論文

- T. KOBAYASHI, F. MATSUI, E. IWAMOTO, H. KIZAKI, M. MIYATA, M. KOYANO, I. YAMAMOTO, S. SUGA and K. SAKAMOTO**, “Temperature-Dependent Electronic Structure of a Quasi-Two-Dimensional Conductor η -Mo₄O₁₁,” *Sci. Rep.* **15**, 9034 (2025). DOI: 10.1038/s41598-025-93355-0
- Y. SATO, Y. FUKAYA, A. NAKANO, T. HOSHI, C. C. LEE, K. YOSHIMI, T. OZAKI, T. NAKASHIMA, Y. ANDO, H. AOYAMA, T. ABUKAWA, Y. TSUJIKAWA, M. HORIO, M. NIIBE, F. KOMORI and I. MATSUDA**, “Surface Structure of the 3×3-Si Phase on Al(111), Studied by the Multiple Usages of Positron Diffraction and Core-Level Photoemission Spectroscopy,” *Phys. Rev. Mater.* **9**(1), 014002 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.9.014002
- Y. HASHIMOTO, J. MIZUNO, H. MATSUDA, F. MATSUI and T. MATSUSHITA**, “High-Resolution Electron Energy Analyzer with Wide Acceptance Angle for Hard X-Ray Photoelectron Holography: Integrating PESCATORA and Retarding Field Analyzer,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **63**(12), 124001 (2024). DOI: 10.35848/1347-4065/ad9447
- F. MATSUI, K. HAGIWARA, Y. SATO, E. NAKAMURA, R. SAGEHASHI, S. KERA and S. SUGA**, “Dual-Beamline Photoelectron Momentum Microscopy for Valence Orbital Characterization,” *Synchrotron Radiat. News* **37**(4), 43–48 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2391256
- T. INOUE, T. INA, H. MASAI, N. KONDO, F. MATSUI, T. KINOSHITA and A. NAKAJIMA**, “Extended X-Ray Absorption Fine Structure (EXAFS) Measurements on Alkali Metal Superatoms of Ta-Atom-Encapsulated Si₁₆ Cage,” *J. Phys. Chem. Lett.* **15**(20), 5376–5381 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.4c00492

K. HAGIWARA, E. NAKAMURA, S. MAKITA, S. SUGA, S. TANAKA, S. KERA and F. MATSUI, “Development of Dual-Beamline Photoelectron Momentum Microscopy for Valence Orbital Analysis,” *J. Synchrotron Radiat.* **31(Pt3)**, 540–546 (2024). DOI: 10.1107/s1600577524002406

H. MATSUDA, K. OZAWA, Y. HASHIMOTO, T. MATSUSHITA and F. MATSUI, “Use of Planar Retarding Field to Improve Energy Resolution of Projection-Type Electron Spectroscopy Collimator Analyzer,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **63(4)**, 046503 (2024). DOI: 10.35848/1347-4065/ad3ab8

B-3) 総説, 著書

H. DAIMON, T. MATSUSHITA, F. MATSUI, K. HAYASHI and Y. WAKABAYASHI, “Recent Advances in Atomic Resolution Three-Dimensional Holography,” *Adv. Phys.:X* **9(1)**, 2350161 (2024). DOI: 10.1080/23746149.2024.2350161

S. KERA, T. ARAKI, K. TANAKA, Y. TAIRA, M. KATOH and F. MATSUI, “UVSOR Synchrotron Facility 40th Anniversary,” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 41–42 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330876

T. YOKOYAMA, F. MATSUI, H. ABE and T. KINOSHITA, “60 Years of Synchrotron Radiation in Japan (JPSR60),” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 43–44 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330877

B-4) 招待講演

松井文彦, 「光電子運動量顕微鏡による電子状態研究：ミルからワカルへ」, 日本物理学会領域 2, 5, 9, 10 合同シンポジウム「先端計測のフロンティア～見えないモノを見る挑戦」, 札幌, 2024 年 9 月.

松井文彦, 「マルチモーダル光電子シネマトグラフィー：表面相転移の観察から解明へ」, NIFS 研究会数理科学・プラズマ科学・物質科学の共通研究拠点形成, 土岐, 2024 年 5 月.

松井文彦, 「顕微 ARPES と光電子顕微鏡：光電子運動量顕微鏡を中心に」, JVSS-MBA 研修セミナー「多様な表面分析が可能な電子分光法」, 仙台, 2024 年 4 月.

F. MATSUI, “Dual-beam (Soft X-ray/VUV) Photoelectron Momentum Microscope,” Korea-Japan Symposium on Molecular Science, Cutting-Edge Molecular Science from Elementary to Complex Systems, Busan (Korea), June 2024.

B-5) 特許出願

登録

特許第 7505794 号, 「球面収差調整カソードレンズ, 球面収差補正静電型レンズ, 電子分光装置, 及び光電子顕微鏡」, 松田博之, 松井文彦 (自然科学研究機構), 2020 年. (登録日 2024 年 6 月 17 日)

特許第 7607953 号, 「静電偏向収束型エネルギー分析器, 結像型電子分光装置, 反射結像型電子分光装置, およびピンベクトル分布イメージング装置」, 松田博之, 松井文彦 (自然科学研究機構), 2021 年. (登録日 2024 年 12 月 20 日)

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会理事 (2021.5–), 協議員 (2023–2025).

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–).

VUV・SX 高輝度光源利用者懇談会幹事 (2024–2026).

日本表面真空学会若手部会運営委員 (2025). (佐藤祐輔)

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 R026 先端計測技術の将来設計委員会運営委員 (2019–2025), 副委員長 (2024–2025).

広島大学放射光科学研究所協議会委員 (2024–2026).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所人事委員会委員 (2024).

量子科学技術研究開発機構 Nanoterasu 利用研究検討委員会委員 (2024–2025).

学会誌編集委員

日本表面真空学会出版委員 (2013–).

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学先端学術院, 「放射光科学」, 2024 年 7 月–8 月.

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的研究(開拓), 「ドーパントの価数ごとの立体原子配列を観測する小型測定装置の研究」(代表: 松下智裕), 松井文彦(研究分担者) (2021 年度–2025 年度).

科研費基盤研究(B), 「グラフェン／h-BN 構造を用いたグラフェン透明アンテナの特性向上に関する研究」(代表者: 黄 晋二), 松井文彦(研究分担者) (2023 年度–2025 年度).

科研費基盤研究(C), 「全角取り込み光電子分光法の開発」, 松田博之 (2021 年度–2025 年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 三菱ケミカル(株), 松井文彦 (2020 年度–).

共同研究, SPECS Surface Nano Analysis GmbH, 「Development of 2D-projection analyzers」, 松井文彦 (2022 年度–2024 年度).

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR 型 Photoelectron Momentum Microscope (PMM) 利用研究を推進する。顕微角度分解光電子分光, 共鳴光電子分光, 3D 波数空間分解光電子分光法を協力研究に供するとともに自身の表面物性科学研究を進める。軟X線ビームラインとVUVビームライン両方を同時にPMMに導くtwo-beam PMM実験ステーションを構築し, 2023年度は両方での運用が始まった。現在2Dスピンスピンフィルタが立ち上がり, 最適化を進め, 両ビームラインを利用したスピンを含めた電子状態解析環境の構築を進めている。基礎研究として磁性薄膜・キラル分子膜の電子状態・原子構造研究を進める。

PMM 開発の先駆者がいる 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きたおかげで, UVSOR でも PMM が順調に立ち上がった。時間分解型の PMM 開発を進めるドイツ・DESY の M. Hoesch らとも共同研究を密にし, こちらからスピン研究に関して相手から時間分解測定法に関して経験技術交流を進めている。本装置を活かした実験を積極的に進めるユーザーコミュニティ構築のための第1回 (2019)・第2回 (2020.10) 国際ワークショップ・第3回 (2022.10) 国際会議特別セッション共催, 第4回 (2023.7) 分子

研研究会，第5回(2024.11)国際会議特別セッション共催と継続的に開催し，東アジア圏でのPMM開発グループの萌芽のネットワークが密になった。2022年にはDESYにて招待講演を行った。UVSORの国内外からのビジビリティを高めるとともに，他のビームラインにも先端拠点を目指す機運と風土の定着を活動指針として進めている。各種分光研究で取得されるデータを有効活用するためのデータフォーマット策定や公開のためのインフラづくりの重要性が近年認識されてきている。多量のデータを協力研究の研究者と共同で解析するために，データ解析ソフトや手法の整備を進めている。学会(放射光学会)，産学連携委員会(R026先端計測)，計測コミュニティー(XAFS)などでデータフォーマット整備の活動に加わっている。UVSOR放射光利用を産業界を含めた広い潜在的ユーザーに拡大する機会ととらえている。

田中 清尚（准教授）（2014 年 4 月 1 日着任）

ZHU, Yupeng（特別訪問研究員）
河野 健人（特別共同利用研究員）
増田 圭亮（特別共同利用研究員）
興田 康人（特別共同利用研究員）
波多江 勇太（特別共同利用研究員）
石原 麻由美（事務支援員）
加茂 恭子（事務支援員）
横田 光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：物性物理学，放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) 新規スピン分解角度分解光電子分光装置の開発
- b) 高温超伝導体の電子状態の解明
- c) UVSOR ビームラインの高精度化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) UVSOR BL5U では高効率イメージスピン分解角度分解光電子分光測定の開発を進めている。昨年度から導入している超高輝度電子銃を用いて電子レンズパラメータの調整を実施し、試料面内 2 軸方向のスピン分解測定可能運動エネルギー領域を、125 eV からビームラインの最低励起光エネルギー（21.2 eV）の領域まで拡大することに成功した。また今年度はユーザー利用開始の最も大きな障害となっていたスピントーゲットの 2 軸モーター制御を新たに開発し導入することに成功した。スピントーゲットを装置に適切なトルクで、再現性良く押し付けることが最大の課題であったが、既製品である 2 軸モータートランスファーシステムの 1 軸機構を完全に取り外し、新たにラックアンドピニオンギアを取り付けることで実現したことに大きな特徴がある。さらに 2 軸モーター制御導入の副次的効果として、試料面直方向のスピン分解測定を実施するための電子レンズパラメータ設定に自由度ができたことで、電子銃での実験ではあるが、はじめて試料位置での角度情報を保ったまま面直方向電子を検出器まで導くことに成功した。来年度は面直方向用の電子レンズパラメータの調整を継続するとともに、面直スピン検出の実証実験を実施する予定である。成功すれば世界初の高効率マルチチャンネル検出器を利用した全方位スピン情報を得ることのできる角度分解光電子分光装置が実現する。
- b) UVSOR BL7U において、銅酸化物高温超伝導体 Bi2213 の角度分解光電子分光測定を行った。超伝導転移温度の上下でのスペクトルを比較することで、超伝導によるスペクトラルウェイト変化の運動量空間依存性とホール濃度依存を導出することに成功した。これまで長い間有効とされてきたフェルミアーキ描像を否定する結果が得られており、高温超伝導が超伝導ギャップよりも超流動密度に強く影響を受けていることを示唆している。現在論文にまとめている。
- c) 放射光のビームラインでは使用する励起光エネルギーを設定したときに、毎回エネルギーとビームスポット位置が再現されることが、高精度な実験、あるいは測定の自動化を実現する上で欠かせない。BL5U では励起光エネルギーの再現性があまりよくないことが問題となっていたが、回折格子の角度制御における機械的な動作の問題を回避するための特別なモーター制御を開発・導入し、再現性を確保することに成功している。他の光電子ビームライン（BL7U）

でも同様の制御システムを導入し、再現性のある励起光エネルギーの提供に成功したが、運用開始後1年後に突然再現性が確保できなくなった。今後の自動測定に向けて最も重要な要素であり、現在原因究明に向けて、ひとつひとつの光学素子制御の確認実験を実施している。

B-1) 学術論文

- Y. MIYAI, S. IDETA, M. ARITA, K. TANAKA, M. ODA, T. KUROSAWA and K. SHIMADA**, “Dual Origin in the Temperature Dependence of the Coupling Parameter for the Strange Metal State in Heavily Overdoped Cuprate Superconductor,” *Phys. Rev. Res.* **7(1)**, L012039 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.7.L012039
- Y. LEE, Y. SUR, S. KIM, J. CHA, J. HYUN, C. LIM, M. HASHIMOTO, D. LU, Y. KIM, S. HUH, C. KIM, S. IDETA, K. TANAKA, K. H. KIM and Y. KIM**, “Coupling Between Electrons and Charge Density Wave Fluctuation and its Possible Role in Superconductivity,” *Adv. Sci.* **11(41)**, 2406043 (2024). DOI: 10.1002/advs.202406043
- Y. NAKAYAMA, K. YAMAUCHI, Y. BABA, K. KIKUCHI, H. HATTORI, F. TESHIMA and K. TANAKA**, “Synchrotron Radiation Fourier-Transform Infrared Absorption Measurements on the Single-Crystal Dinaphtho[2,3-*b*:2',3'-*f*]thieno[3,2-*b*]thiophene,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **63(9)**, 09SP07 (2024). DOI: 10.35848/1347-4065/ad70c0
- T. KATO, K. NAKAYAMA, Y. LI, Z. WANG, K. SUGAWARA, K. TANAKA, T. TAKAHASHI, Y. YAO and T. SATO**, “Quasi-Homoepitaxial Growth of Highly Strained Alkali-Metal Ultrathin Films on Kagome Superconductors,” *Adv. Sci.* **11(29)**, 2309003 (2024). DOI: 10.1002/advs.202309003
- R. FUKUSHIMA, V. N. ANTONOV, M. M. OTROKOV, T. T. SASAKI, R. AKIYAMA, K. SUMIDA, K. ISHIHARA, S. ICHINOKURA, K. TANAKA, Y. TAKEDA, D. P. SALINAS, S. V. EREMEEV, E. V. CHULKOV, A. ERNST and T. HIRAHARA**, “Direct Evidence of Induced Magnetic Moment in Se and the Role of Misplaced Mn in MnBi₂Se₄-Based Intrinsic Magnetic Topological Insulator Heterostructures,” *Phys. Rev. Mater.* **8(8)**, 084202 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.8.084202
- T. KAWASAKI, A. NAGASE, K. HAYAKAWA, F. TESHIMA, K. TANAKA, H. ZEN, A. IRIZAWA, T. SAKAI and Y. HAYAKAWA**, “Investigating Structural Property of Human Hair by Using Infrared Free Electron Lasers,” *Discover Appl. Sci.* **6(8)**, 397 (2024). DOI: 10.1007/s42452-024-06104-9
- J. P. ITHIKKAL, K. FUKUTANI, F. NISHINO, T. MINATO, H. ISHII, S. IZAWA, K. TANAKA, M. HIRAMOTO and S. KERA**, “Direct Observation of the Electronic Structure and Many-Body Interactions of Low-Mobility Carriers in Perylene Diimide Derivative,” *Appl. Phys. Lett.* **125(5)**, 052102 (2024). DOI: 10.1063/5.02212938.
- K. YAMAGUCHI, M. NIIBE, X. ZHANG, T. SUMI, M. HORIO, Y. ANDO, J. YAMAURA, E. NAKAMURA, K. TANAKA, T. KONDO and I. MATSUDA**, “Macroscopic Sheets of Hydrogen Boride and Their Spectroscopic Evaluation,” *Phys. Rev. Mater.* **8(7)**, 074005 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.8.074005
- S. ICHINOKURA, K. TOKUDA, M. TOYODA, K. TANAKA, S. SAITO and T. HIRAHARA**, “Van Hove Singularity and Enhanced Superconductivity in Ca-Intercalated Bilayer Graphene Induced by Confinement Epitaxy,” *ACS Nano* **18(21)**, 13738–13744 (2024). DOI: 10.1021/acsnano.4c01757
- Y. NAKAYAMA, J. MIYAMOTO, K. YAMAUCHI, Y. BABA, F. TESHIMA and K. TANAKA**, “Far- and Mid-Infrared FT-IR Analysis of the Single-Crystal Pentacene Using a Linearly Polarized Synchrotron Radiation Light Source,” *Vib. Spectrosc.* **132**, 103681 (2024). DOI: 10.1016/j.vibspec.2024.103681

D. OOTSUKI, H. TAKATSU, K. FUNADA, T. ISHIDA, M. ARITA, S. IDETA, K. TANAKA, H. KAGEYAMA and T. YOSHIDA, “Tiny Fermi Surface with an Extremely Light Mass of Ternary Chalcopyrite CdSnAs₂ Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy,” *Phys. Rev. Mater.* **8(4)**, 044604 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.8.044604

B-3) 総説, 著書

S. KERA, T. ARAKI, K. TANAKA, Y. TAIRA, M. KATOH and F. MATSUI, “UVSOR Synchrotron Facility 40th Anniversary,” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 41–42 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330876

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「最新の高分解能光電子分光による高温超伝導体スピン電荷ストライプ相の電子状態の解明」, 田中清尚 (2024年度–2026年度).

C) 研究活動の課題と展望

開発中のスピン分解ARPESシステムは、試料面内2軸方向のイメージでのスピン分解スペクトルの取得に成功し、運動量空間分解能や検出効率なども既存システムを大きく上回ることも確認できている。ユーザー利用の障害となっていたスピントラゲットの磁化操作については自動化に成功し利便性が大きく向上した。これまで一番問題となっていた面直方向スピン測定も実装する目途が立ちつつある状況である。これまでスピン分解測定は一部ユーザーには開放していたが、一般ユーザーの利用開始に向けて整備を急ぎたい。

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

荒木 暢（主任研究員）（2023 年 1 月 1 日着任）

石原 麻由美（事務支援員）

加茂 恭子（事務支援員）

横田 光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) 軟X線吸収分光を基礎とした生命科学へのアプローチ
- b) 液中観察のためのX線分光顕微鏡と試料環境開発
- c) 夾雑環境生体試料の定量化学状態マッピング

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 軟X線吸収分光を基礎とした生命科学へのアプローチ；UVSOR の次期計画を念頭に、既存の軟X線ビームラインを利用したトライアルとして、以下の2つの試料システムについて Scanning Transmission X-ray Microscopy (STXM) による実験を行った。

光合成タンパク質の超複合体の測定を行い、鉄の L 吸収端 X 線吸収スペクトル (XAS) において十分なレベルの信号を検出でき、スペクトルを正しく測定できることを確認したが、マンガンについては限られたビームタイム中では検出できなかった。更に実験を行い、鉄およびマンガンの共鳴 X 線散乱の実験に繋がりたいと考えている。

極限環境下で乾眠することが知られているクマムシについて、その微視的解剖学の観点から、樹脂に包埋した超薄切片試料について STXM 観察を行った。炭素、窒素、酸素の K 吸収端ではエネルギーを変化させる（特定の吸収構造に合わせる）ことでオルガネラに対応すると思われる微細構造が観察され、Scanning Electron Microscopy (SEM) で観察された構造にほぼ対応していることを確認した。今後、相補的な観点で用いる SEM との対比などを共同研究者と議論し、① STXM でしか見えない構造があるのか？ ② SEM で観察されている構造の特定に STXM が寄与できるか？ といったことを明らかにし、研究を進めたい。

X 線のコヒーレンスを生かしたイメージング（散乱からの像再構成）について現在の UVSOR および次期リングでの実現を検討するために、先行する海外施設での装置見学および実験を検討し、実際に、蓄積リングのサイズこそ大きいもの、そのエミッタンス（電子ビームのサイズ×発散角）がほぼ同じである Canadian Light Source (CLS) のコミッション実験に参加した。上記のクマムシ試料を使った Ptychography（コヒーレントイメージングの一つ）のテスト実験において、確かな空間分解能の向上（X 線のビームサイズで決まる分解能よりも優れていること）を確認した。

- b) 液中観察のためのX線分光顕微鏡と試料環境開発；Diamond Light Source において硬X線顕微分光によって液中セルを使ったバクテリアに金ナノ粒子が担持されたポリマー粒子を添加した試料の観察を共同研究者と行った。金の酸化状態を XAS スペクトル測定から決定した。今後、軟X線領域での STXM でも同様の試料の観察を計画している。Transmission Electron Microscopy (TEM) 用に開発されたセルを利用した実験であり、今後の STXM 実験の参考になるものであった。TEM 用の液体セルの活用または、独自セルの開発の2つの観点で計画を進める。試料自体を走

査する STXM の場合、液中セル自体を揺さぶることになるため、今後、集光X線の走査または結像型による試料を固定した状態での測定を模索する。また、液体エタンなどを冷媒に用いた急速凍結による試料準備のオプションも併せて検討する。TEM 試料セルの利用は、現在検討中の TEM とX線イメージング・共鳴散乱手法の相補利用も念頭にその導入を進める。

- c) 夾雑環境生体試料の定量化学状態マッピング：細胞中の「夾雑環境」で、これまで高分子研究や皮膚への薬剤の浸透などで発揮された化学状態弁別性とメソスケールの空間分解能を生かした定量分析をどう実現するかを検討する。上記のクマムシの共同研究もその一つである。NINS の本部主導のフォトンバイオロジー研究プラットフォーム：PBRP を通じて、東北大の医学・農学研究科、量子生命研究所のメンバーと UVSOR を使ったフィージビリティ実験を行った（R6 年度前期）。1 件については日本バイオイメーjing学会にて発表が行われた。後期は同様の実験と、更に、PBRP で立ち上げるプロジェクト：X線によるオルガネラソーティングの基礎データ収集を行う予定である。

B-1) 学術論文

J. A. LAUX, T. OHIGASHI, M. R. BITTERMANN, T. ARAKI, H. YUZAWA, F. RANCAN, A. VOGT and E. RÜHL, “Scanning Transmission Soft X-Ray Microscopy Probes Topical Drug Delivery of Rapamycin Facilitated by Microneedles,” *ChemPhysChem* **26(2)**, e202400819 (2025). DOI: 10.1002/cphc.202400819

T. MATSUMOTO, T. NOGUCHI, A. MIYAKE, Y. IGAMI, M. MATSUMOTO, T. YADA, M. UESUGI, M. YASUTAKE, K. UESUGI, A. TAKEUCHI, H. YUZAWA, T. OHIGASHI and T. ARAKI, “Sodium Carbonates on Ryugu as Evidence of Highly Saline Water in the Outer Solar System,” *Nat. Astron.* **8(12)**, 1536–1543 (2024). DOI: 10.1038/s41550-024-02418-1

B-3) 総説、著書

S. KERA, T. ARAKI, K. TANAKA, Y. TAIRA, M. KATOH and F. MATSUI, “UVSOR Synchrotron Facility 40th Anniversary,” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 41–42 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330876

B-4) 招待講演

荒木 暢, 「軟X線顕微分光法」, 第 16 回日本放射光学会放射光基礎講習会, 仙台 (ハイブリッド開催), 2024 年 9 月。

B-8) 大学等での講義、客員

Diamond Light Source, Visiting Scientist, 2023 年–。

B-10) 競争的資金

生命創成探究センター特別共同研究, 「無水生物学を開拓する技術基盤の構築とその展開」, 荒木 暢 (2024 年度)。

岩山 洋士（助教）（2010年4月1日～2024年4月15日）
（主任研究員）（2024年4月16日昇任）

石原 麻由美（事務支援員）
加茂 恭子（事務支援員）
横田 光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：軟X線構造解析，軟X線顕微鏡法，ソフトマター，X線非線形光学

A-2) 研究課題：

- a) 軟X線共鳴散乱法によるソフトマターのメゾスコピック構造解析
- b) 密着型軟X線顕微鏡法による生体試料の XAFS イメージング
- c) X線自由電子レーザーを用いた溶液表面における二次高調波発生による化学状態分析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 高分子，液晶，コロイドなどのソフトマターは，メゾスコピック領域に特徴的な構造を持ち，多くの物性はその構造に由来する。偏光顕微鏡などで観察できない数 nm から数 100nm 程度のメゾスコピック領域の構造をしらべる手法として，X線小角散乱法が用いられ，多くの成果が挙げられている。しかしながら，X線小角散乱は試料の電子密度の変調に対して敏感であるが，電子密度の近い多成分系における特定の成分の構造や，ねじれ構造などの観測は難しい。X線共鳴過程を用いることで元素・分子種・分子配向に選択性を有する散乱光をえることができる。しかしソフトマターの主成分である軽元素（炭素，窒素，酸素など）のX線共鳴エネルギーは，0.1 eV ～ 1 keV の軟X線領域であり，X線小角散乱法で使用する 10 keV 程度のX線とは一致しない。そのため，我々は軟X線領域の共鳴散乱光を観測できるための手法（共鳴軟X線散乱法）を行っている。我々は UVSOR のビームライン BL3U および Photon Factory BL7A において，共鳴軟X線散乱装置を開発し，高分子や液晶の構造解析を行っている。本年度は，入射光エネルギーをスキャンしながら散乱画像を取得するプログラムを開発し，炭素，窒素，酸素の K 殻吸収端の内殻共鳴に相当する軟X線を用いて，有機薄膜太陽電池のバルクヘテロジャンクション構造の解析や，多成分系の有機薄膜の成分ごとの解析，キラル液晶のモルフォロジーの解析を行った。また，放射光施設 Photon Factory BL7A では，軟X線検出器が回転できることを利用し，反射率計測することで膜厚評価できるシステムを構築した。
- b) 2023 年度より，軟X線による生体試料の可視化を実現すべく密着型軟X線顕微鏡の開発を始めた。本手法では，シンチレーター上に細胞を培養し，Si₃N₄ メンブレン（100 nm）で封入することで，軟X線を照射し，その透過光像をシンチレーターで可視光に変換し，細胞を観測する。10 月ごろより，犬の腎臓尿細管上皮細胞由来の細胞株である MDCK 細胞などの標準的な細胞を培養し，使うことにした。また，そのための細胞培養準備室を明大寺に設置した。今期は細胞に軟X線を照射する装置を改良し，従来気泡などがはいる，測定がうまくいかなかったことを，ヘリウム雰囲気下で実験することで解決した。また軟X線およびテnder X線を使うことで，軽元素 C, N, O に加え S, P などの元素についても測定できる環境を整備している。
- c) X線自由電子レーザー SACLA BL1 を利用した液体試料を対象とした実験装置の開発を進めている。昨年度は，Nevada 大の Craig Schwartz さんと液体表面からの二次高調波発生の実験を行った。液体表面などの界面においては，空間対称性の破れより，二次高調波が発生する。そのため，二次高調波を観測することで表面敏感な実験を行うこ

とができる。特に液体表面は気液界面であるため、反応場として重要であり、その化学状態を測定する手法は重要である。また軟X線の共鳴過程を利用することで、表面の特定の元素の化学状態を選択的に観測できる長所がある。そのため、SACLA BL1を利用して、高強度の軟X線パルスを鉄硝酸水溶液の超薄膜フラットジェットに照射し、その反射光を、斜入射分光器で分光観測した。現在解析中である。

B-1) 学術論文

T. N. TRAN, T. HAYASHI, H. IWAYAMA, M. SEKINE, M. HORI and K. ISHIKAWA, “Hydrofluoroethane Plasma Etching of SiN, SiO₂, and poly-Si Films with CHF₂CF₃, CF₃CH₃, and CHF₂CH₃,” *Appl. Surf. Sci.* **684**, 161815 (2025). DOI: 10.1016/j.apsusc.2024.161815

T. WALMSLEY, J. W. MCMANUS, Y. KUMAGAI, K. NAGAYA, J. HARRIES, H. IWAYAMA, M. N. R. ASHFOLD, M. BRITTON, P. H. BUCKSBAUM, B. DOWNES-WARD, T. DRIVER, D. HEATHCOTE, P. HOCKETT, A. J. HOWARD, J. W. L. LEE, Y. LIU, E. KUKK, D. MILESEVIC, R. S. MINNS, A. NIOZU, J. NISKANEN, A. J. ORR-EWING, S. OWADA, P. A. ROBERTSON, D. ROLLES, A. RUDENKO, K. UEDA, J. UNWIN, C. VALLANCE, M. BROUARD, M. BURT, F. ALLUM and R. FORBES, “The Role of Momentum Partitioning in Covariance Ion Imaging Analysis,” *J. Phys. Chem. A* **128**(22), 4548–4560 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpca.4c00999

W. O. RAZMUS, F. ALLUM, J. HARRIES, Y. KUMAGAI, K. NAGAYA, S. BHATTACHARYYA, M. BRITTON, M. BROUARD, P. H. BUCKSBAUM, K. CHEUNG, S. W. CRANE, M. FUSHITANI, I. GABALSKI, T. GEJO, A. GHRIST, D. HEATHCOTE, Y. HIKOSAKA, A. HISHIKAWA, P. HOCKETT, E. JONES, E. KUKK, H. IWAYAMA, H. V. S. LAM, J. W. MCMANUS, D. MILESEVIC, J. MIKOSCH, S. MINEMOTO, A. NIOZU, A. J. ORR-EWING, S. OWADA, D. ROLLES, A. RUDENKO, D. TOWNSEND, K. UEDA, J. UNWIN, C. VALLANCE, A. VENKATACHALAM, S. WADA, T. WALMSLEY, E. M. WARNE, J. L. WOODHOUSE, M. BURT, M. N. R. ASHFOLD, R. S. MINNS and R. FORBES, “Exploring the Ultrafast and Isomer-Dependent Photodissociation of Iodothiophenes via Site-Selective Ionization,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26**(16), 12725–12737 (2024). DOI: 10.1039/d3cp06079a

Y. UMEDA, H. ONO, K. YAMAMOTO, O. ISHIYAMA, H. IWAYAMA, E. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, M. MIZUGUCHI and T. MIYAMACHI, “Annealing Temperature Dependence of Magnetic Properties in FeCo Ordered Alloy Thin Films Fabricated Using the Nitrogen Surfactant Effect,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **63**(4), 04SP80 (2024). DOI: 10.35848/1347-4065/ad396b

J. UNWIN, W. O. RAZMUS, F. ALLUM, J. R. HARRIES, Y. KUMAGAI, K. NAGAYA, M. BRITTON, M. BROUARD, P. BUCKSBAUM, M. FUSHITANI, I. GABALSKI, T. GEJO, P. HOCKETT, A. J. HOWARD, H. IWAYAMA, E. KUKK, C.-S. LAM, J. MCMANUS, R. S. MINNS, A. NIOZU, S. NISHIMURO, J. NISKANEN, S. OWADA, J. D. PICKERING, D. ROLLES, J. SOMPER, K. UEDA, S.-I. WADA, T. WALMSLEY, J. L. WOODHOUSE, R. FORBES, M. BURT and E. M. WARNE, “Time-Resolved Probing of the Iodobenzene C-Band Using XUV-Induced Electron Transfer Dynamics,” *ACS Phys. Chem. Au* **4**(6), 620–631 (2024). DOI: 10.1021/acspyschemau.4c00036

M. KOBAYASHI, S. YOSHIMURA, H. IWAYAMA, N. KONDO, J. TAKAHASHI, H. OTA, M. KATOH, K. KOBAYASHI and H. NAKAMURA, “First Attempt at Photoionized Plasma Production with VUV Radiation in Synchrotron Light Source UVSOR-III,” *Plasma Fusion Res.* **19**, 1301028 (2024). DOI: 10.1585/pfr.19.1301028

B-4) 招待講演

岩山洋士,「放射光で見る EUV 露光の光化学」, EUV フォトン第三回研究会, 福岡, 2025 年 3 月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本放射光学会年次大会プログラム編集 (2024–2026).

学会誌編集委員

原子衝突学会学会誌編集員 (2020–).

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構 OPEN MIX LAB (OML) 公募研究プログラム (研究共創型),「放射光 X 線による心筋細胞内の超硫黄分子のバイオイメーキング」, 岩山洋士 (2024 年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 三菱ケミカル (株), 岩山洋士 (2023 年度–2024 年度).

4-6 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）

倉橋 直也（特任助教）

前島 尚行（特任助教）

栗田 佳子（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面科学，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不均一触媒その場観察への応用
- b) X線磁気円二色性などを用いた磁性薄膜の磁気構造解析
- c) X線吸収分光を用いた機能合金の局所構造と熱的性質
- d) X線発光分光による固体高分子形燃料電池の電解質に関する研究
- e) 遷移金属リン化合物単結晶・薄膜の触媒活性・磁性に関する研究

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不均一触媒の反応進行中のオペランド観測を行っている。本設備は NEDO 燃料電池プロジェクトにより導入され、固体高分子形燃料電池（PEFC）電極触媒の in situ 測定を行っていたが、NEDO 終了後は、より一般的な不均一触媒等について対象を拡げて研究を遂行しているものである。
- b) 分子研シンクロトン放射光施設 UVSOR-III BL4B を用いた高磁場極低温X線磁気円二色性法（XMCD）を共同利用公開し、様々な磁性薄膜の磁気特性検討について国内外との共同研究を広く実施している。また、磁性薄膜の原子層毎の磁性を解析するべく軟X線共鳴反射測定技術開発を行っているところである。
- c) X線吸収分光を用いて、強磁性などの機能を発現する合金の局所構造と熱的性質を理論計算を含めて検討している。
- d) X線発光分光による固体高分子形燃料電池の電解質に関する研究を始めた。
- e) 遷移金属リン化合物単結晶・薄膜の触媒活性・磁性に関する研究を始めた。

B-1) 学術論文

T. YOKOYAMA, H. T. FUJII, S. MATSUMURA, N. SAKAGUCHI, N. KURAHASHI and N. MAEJIMA, “Local Thermal Expansion of Co-Containing Invar Alloys,” *Phys. Rev. Mater.* **8**, 083603 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.8.083603
Y. UMEDA, H. ONO, K. YAMAMOTO, O. ISHIYAMA, H. IWAYAMA, E. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, M. MIZUGUCHI and T. MIYAMACHI, “Annealing Temperature Dependence of Magnetic Properties in FeCo Ordered Alloy Thin Films Fabricated Using the Nitrogen Surfactant Effect,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **63**(4), 04SP80 (2024). DOI: 10.35848/1347-4065/ad396b

B-3) 総説, 著書

T. KOITAYA and T. YOKOYAMA, “Operando Characterization of Copper-Zinc-Alumina Catalyst for Methanol Synthesis by Ambient-Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy,” *SPring-8 Research Frontiers* 2023, 78–79 (2024).

T. YOKOYAMA, F. MATSUI, H. ABE and T. KINOSHITA, “60 Years of Synchrotron Radiation in Japan (JPSR60),” *Synchrotron Radiat. News* **37(2)**, 43–44 (2024). DOI: 10.1080/08940886.2024.2330877

B-4) 招待講演

倉橋直也, 「放射光を利用した分光分析の医用高分子への展開」, 第 41 回医用高分子研究会講座, 東京都八王子市, 2024 年 11 月.

倉橋直也, 「さまざまな光を使った機能性高分子材料の解析」, 日本ゴム協会 2024 年年次大会, 名古屋, 2024 年 5 月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会評議員 (2024–2026).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

広島大学 放射光科学研究センター協議会委員 (2020–).

未来工学研究所「宇宙・海洋・地球・科学基盤分科会」委員 (2023–2024).

理科教育活動

指導・助言「探究 AKCII」愛知県立岡崎高等学校 (2024 年度). (倉橋直也)

その他

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ・スポーク機関「マテリアルの高度循環のための技術」業務主任者 (2021–2031).

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ・運営機構業務「横断技術領域 (物質・材料合成プロセス)」業務主任者 (2022–2031).

本多記念会本多記念研究奨励賞受賞候補者選考委員会委員 (2024–2025).

B-10) 競争的資金

科研費若手研究, 「テンダー X 線発光分光法によるプロトン伝導性高分子膜の電子状態解析」, 倉橋直也 (2024 年度–2027 年度).

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, 2017 年度に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行ってきた。2022年度は、SPring-8を用いた雰囲気制御光電子分光等を用いた表面化学反応研究、UVSORを利用した共鳴X線磁気散乱による磁性薄膜解析、KEK-PFを用いた合金のEXAFS局所構造解析等を行った。2022年8月に小板谷助教が転出、2023年4月に山本助教が転出、2022年12月に倉橋特任助教が着任、公募中であつたもう1名の特任助教として2023年8月16日に前島尚行特任助教が着任した。退職まで1年半であるが、X線発光分光による固体高分子形燃料電池の電解質に関する研究、遷移金属リン化合物単結晶・薄膜の触媒活性・磁性に関する研究を新たに展開し始めた。

杉本 敏樹（准教授）（2018年5月1日着任）

櫻井 敦教（助教）
金井 恒人（特任講師）
斎藤 晃（若手研究者雇用特別研究員）
高橋 翔太（若手研究者雇用特別研究員）
佐藤 宏祐（特任研究員）
瀬戸 啓介（特任研究員）
御領 紫苑（研究員）
林 仲秋（大学院生）
望月 達人（大学院生）
金 成翔（大学院生）
吉澤 龍（大学院生）
常川 響（大学院生）
高原 裕大（大学院生）
手塚 玄惟（特別共同利用研究員）
榊原 隆之（技術支援員）
志村 真希（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，分光学，機能物性化学，表面界面科学

A-2) 研究課題：

- a) 非熱的触媒反応系のオペランド分光と新奇界面現象の発見
- b) 高感度ラマン分光計測法の開発と電子非共鳴・表面プラズモン共鳴から脱却した表面分子吸着系の汎用的ラマン観測の実現
- c) 高次非線形分光法の開発と埋没界面フォノン・分子観測への応用
- d) 二次非線形極微分光法の開発と金属ナノギャップにおける新奇非線形光学応答現象の発見

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 天然ガス中に豊富に含まれる資源であるメタンを光により活性化させ，次世代エネルギー媒体としての水素を取り出すと共に，化学的により付加価値が高い分子に変換させる光触媒技術は持続可能な社会の実現に向けて重要な化学技術である。一般に，光触媒分野において酸化物光触媒に担持する金属助触媒は，光誘起電子を補足し還元反応（水素発生）を促進することが広く想定されている。ところが，赤外分光法を用いてメタンと水の混合反応条件下における光誘起キャリア（電子・正孔）のオペランド分光を行ったところ，金属助触媒に注入される光誘起電子ではなく，下地の酸化物と金属助触媒の間の複合界面（金属助触媒の縁）にトラップされた光誘起電子が水素発生に対して高い反応活性を示すことが判明した [*J. Am. Chem. Soc.* **146**, 24800 (2024)]。実際に，原子間力顕微鏡を用いたケルビンプローブ力測定を実施し局所仕事関数を観測したところ，下地の酸化物と金属助触媒の間の複合界面における光誘起キャリアの存在サイトを特定するに至っている [Sato *et al.*, in preparation]。また，担持する金属種と担持量に依存して，メタンと水の混合系における完全酸化種・部分酸化種の反応選択性・及び反応カインेटクスが大きく変調されることを見出し，「金属助触媒が正孔を補足し酸化反応にも積極的に関与している」 [*Angew. Chem., Int. Ed.* **62**, e2023060

(2023)]]という我々が禁煙世界に先駆けて提示した新たな描像をさらに裏付ける重要な証拠を得た [Chem. Commun., in press (2025)]。これらの触媒材料側に関する最先端の知見を生み出すだけでなく、表面分子科学の観点からは、水蒸気雰囲気下の非熱的水分解水素発生反応において触媒活性が最大になる反応条件を解明し、水分子の存在量や水素結合構造／状態を設計・制御する方向性、すなわち『界面水のエンジニアリング』により既存の限界を突破して水素発生反応の更なる活性向上を図る新たな研究開発の方向性を示すことに成功した [J. Am. Chem. Soc. **146**, 22276 (2024)]。

- b) 二つの光の差周波の喰りによって分子振動を共鳴励起（強制振動）させる非線形ラマン分光法に着目し、MHz 高繰り返しフェムト秒レーザーをベースとして時間的に非対称なパルス波形の成形とパルス遅延の精密制御を導入することで、電子共鳴あるいはプラズモン共鳴を用いて信号増大させることができない表面吸着分子系についても汎用的かつ高感度にラマン活性モードの観測を可能とする新しい界面非線形分子分光法を開発した。この新規方法論により、三次非線形ラマン分光法を表面界面系に適用する際に問題となるバルク由来の非共鳴バックグラウンド信号を4桁以上低減させることが可能となった [T. Sugimoto *et al.*, submitted]。これにより、我々は代表的な金属・絶縁体の表面分子系として Pt(111)・Au(111)・SiO₂(0001) 基板表面に吸着した水分子の超薄膜やサブナノメートル薄さの自己組織化単分子膜の計測に成功した [Yoshizawa *et al.*, in preparation, Takahara *et al.*, in preparation, Commun. Mater. **5**, 204 (2024), Phys. Rev. Mater. **7**, 115803 (2023)]。とりわけ、本分光手法において重要となる ω_3 パルスの時間遅延をフェムト秒オーダーで精密に制御することにより、表面分子系のラマン活性振動モードの超高速ダイナミクスの計測に世界初で成功すると共に、この方法論をアモルファス物質に適用することで、アモルファス物質のブロードな振動スペクトルを一意的に成分分解する新しい解析方法論の開発に成功した [Yoshizawa *et al.*, in preparation]。
- c) 和周波発生振動分光法に代表される二次非線形分光法は空間反転対称性が破れたドメインに選択的な計測手法であり、表面界面観測に広く用いられている。しかし、振動励起に赤外光を用いるため、赤外光が透過しない“物質に埋没した界面”の観測には適用できない。これを克服するため、物質中を透過する二つの光の差周波の喰りで分子振動を共鳴励起（強制振動）させ、それを第二高調波でコヒーレントにアップコンバージョンさせる四次非線形光学過程に基づく振動分光法を展開し始めている。特に、この手法を用いて、空間反転対称性が無い水晶 (SiO₂) 薄膜の観測に透過配置と反射配置でそれぞれ成功し、更に、水溶液中に埋没した電極表面由来の信号計測に成功してきた [Kanai *et al.*, in preparation]。また、非対称にパルスシェーブした光照射により三次非線形光学効果を誘起することで、既存の分光法では困難であった、水溶液環境下に埋没したモデル炭素電極表面やナノ分子修飾電極表面における溶液-電極界面の高感度観測や、電気化学条件下におけるそれらの状態変化をオペランド観測で捉えることにも成果に先駆けて成功するに至った [Kin *et al.*, in preparation, Kanai *et al.*, in preparation]。
- d) 走査トンネル顕微鏡 (STM) と和周波発生振動分光法を組み合わせ、水分子吸着系の水素結合ネットワークにおいて機能発現のカギを握る重要な構造情報である“水分子の配向 (水素の H-up・H-down 配置)”を高い空間分解能で観測する二次非線形極微分光法 (探針増強和周波発生振動分光法) の開発に世界に先駆けて取り組んでいる。その要素技術として、①先端形状を制御したプラズモニック Au ナノ探針の作成 [Mochizuki *et al.*, in preparation], 及び②光の回折限界以下のナノ探針先端領域からの第二高調波発生 (SHG) 信号の検知 [J. Phys. Chem. Lett. **14**, 6919 (2023)], に成功してきた。特に我々は、数 10MHz オーダーの高繰り返しレーザー光源を用いた赤外波長可変 OPO システムを新たに光学系に組み込むことで、可視域から中赤外領域にわたる幅広い波長領域において Au ナノ探針-Au(111) 基板間のナノギャップに存在する分子系の和周波発生振動スペクトルの計測に成功するに至った [Asakurai *et al.*, submitted (Nano Lett., under review)]。現在は、STM の電場変調でナノギャップからの近接場和周波発生信号を飛躍的に増大させる新

技術の構築にも成功すると共に[Takahashi *et al.*, submitted (*Nat. Photonics*, under review)], Pt や Ni などの非プラズモニックな基板表面の分子系に対する探針増強和周波発生振動分光にも世界に先駆けて成功してきている [Mochizuki *et al.*, in preparation, 講演奨励賞受賞 (望月達人), 第 23 回日本表面真空学会中部支部若手講演会]。

B-1) 学術論文

H. SATO, H. SAITO, T. HIGASHI and T. SUGIMOTO, “Critical Impacts of Metal Cocatalysts on Oxidation Kinetics and Optimal Reaction Conditions of Photocatalytic Methane Reforming,” *Chem. Commun.* **61**, 5942–5945 (2025). DOI: 10.1039/D4CC06774F

N. AIGA and T. SUGIMOTO, “Tuning the Thermodynamic Ordering of Strongly Correlated Protons in Ice by Angstrom-Scale Interface Modification,” *Commun. Mater.* **5**, 204 (2024). DOI: 10.1038/s43246-024-00648-4

H. SATO and T. SUGIMOTO, “Direct Operando Identification of Reactive Electron Species Driving Photocatalytic Hydrogen Evolution on Metal-Loaded Oxides,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(36), 24800–24807 (2024). DOI: 10.1021/jacs.3c14558

Z. LIN, H. SAITO, H. SATO and T. SUGIMOTO, “Positive and Negative Impacts of Interfacial Hydrogen Bonds on Photocatalytic Hydrogen Evolution,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(32), 22276–22283 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c04271

B-4) 招待講演

杉本敏樹, 「非熱的メタン転換触媒技術の学理を拓くオペランド分光/表面計測」, 第 14 回次世代天然ガス利用を考える若手勉強会, 静岡, 2024 年 12 月.

杉本敏樹, 「オペランド分光法による触媒 反応場における界面水の分子科学」, 学術変革領域研究 (A) イオン渋滞学第一回固体触媒 WG, 東京, 2024 年 9 月.

杉本敏樹, 「界面非線形振動分光法の 新たな動向紹介～最近の挑戦例から～」, 学術変革領域研究 (A) イオン渋滞学第一回複合材料 WG, 名古屋, 2024 年 9 月.

A. SAKURAI, “Tip-enhanced sum frequency generation for molecular vibrational nanospectroscopy,” Oktoberfest of Chemical Physics, Okazaki (Japan), October 2024.

A. SAKURAI, “Tip-enhanced sum frequency generation for molecular vibrational nanospectroscopy,” Korea-Japan Symposium on Molecular Science 2024, Busan (Korea), June 2024.

T. SUGIMOTO, “Pioneering nonlinear optical spectroscopy to break through the detection limit of nanoscale interfaces,” 2024 Korea-Japan Symposium on Molecular Science, Busan (Korea), June 2024.

B-6) 受賞, 表彰

杉本敏樹, OPIC, TILA-LIC international conference 2024 Best paper award (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会若手部会幹事 (2018–).

分子科学会運営委員 (2020–).

学会の組織委員等

日本物理学会領域運営委員(領域9)(2024–2025)。(櫻井敦教)

日本物理学会第79回年次大会講演座長(領域9)(2024)。(櫻井敦教)

日本物理学会2025年春季大会シンポジウム提案および世話人(領域9)(2025)。(櫻井敦教)

日本表面真空学会若手部会運営委員(2025)。(佐藤宏祐)

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

文部科学省学術調査官(2021–2023)。

その他

分子科学若手の会夏の学校分子科学研究所対応者(2018–)。

B-8) 大学等での講義, 客員

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月–2025年3月。

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月–2025年3月。(櫻井敦教)

B-9) 学位授与

LIN, Zhongqiu, “Critical Impacts of Interfacial Hydrogen Bonds on Photocatalytic Hydrogen Evolution via Water Splitting,”
2025年3月, 博士(理学)。

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A), 「新原理高次非線形分光法で拓く未踏の電気化学固液ナノ界面水研究」, 杉本敏樹(2022年度–2024年度)。

科研費基盤研究(B), 「探針増強を用いた振動和周波発生分光法の実現と表面分子科学の開拓」, 櫻井敦教(2023年度–2026年度)。

科研費挑戦的研究(萌芽), 「少数分子の配向を検出可能にする新規振動和周波発生分光法の創出」, 櫻井敦教(2024年度–2025年度)。

科学技術振興機構ACT-X研究(受託研究), 「光触媒表面の反応場設計を拓く光誘起活性種のオペランド分光」, 斎藤 晃(2024年度–2025年度)。

科研費基盤研究(B), 「zepto秒原子・分子・素粒子物理学のための中赤外レーザー駆動X線分光システムの開発」, 金井恒人(2024年度–2025年度)。

科学技術振興機構CREST研究(受託研究), 「in-situ 高次非線形分光によるアップサイクリング反応場観測」(代表: 斎藤 進), 杉本敏樹(共同研究者)(2022年度–2027年度)。

早稲田大学環境省委託事業「地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた革新的触媒技術の開発・実証事業」(受託研究), 「革新的多元素ナノ合金触媒・反応場活用による省エネ地域資源循環を実現する技術開発(非在来型触媒反応による次世代プロセス開発と学理構築)」(代表: 関根 泰), 杉本敏樹(共同実施者)(2022年度–2029年度)。

科学技術振興機構創発的研究支援事業(受託研究), 「次世代アクアナノ界面機能化学を拓く高次非線形分子分光」, 杉本敏樹(2023年度–2025年度)。

科研費学術変革領域研究(A), 「イオン渋滞現象の解明に向けた高度計測技術の統合利用」(代表者: 中村崇司), 杉本敏樹(研究分担者)(2024年度–2028年度)。

C) 研究活動の課題と展望

表面界面系の分子計測法の限界突破を目指し、従来の手法では困難であった「①プラズモン共鳴・電子共鳴が利用できない表面界面少数分子系に対しても汎用的に振動分光計測を可能とする新しい非線形分光計測法の開発」、並びに「②光の回折限界以下のナノスケールで表面界面分子系の観測を可能とする新たな極微非線形分光法の開発」に従事してきた。また、こうした地道かつ先進的な手法開発・挑戦と同時平行的に、「③光触媒微粒子をはじめとする複雑な実材料系の表面界面分子科学現象の開拓」にも取り組んできた。2018年5月に当研究室発足以来、これら3つの基軸で挑戦してきた分野先導的な試みは芽を出し大きく開花しつつあり、現在、それぞれの取り組みにおいて相当規模の競争的資金の獲得と共に成果発信、共同研究もすすんできている。

今後は、これまで独立に挑戦してきたこれら3つの取り組みをさらに高度に融合させていくことにも注力し、従来の実験手法で開拓・解明が困難であった未踏の表面界面系領域や実材料系・複雑系界面の分子科学を力強く開拓する。また、それと同時並行的に、このような先端的な計測研究を産学官緊密連携の下で大きく発展・応用させることにより、『表面界面エンジニアリング』・『界面分子戦略』に基づく革新的な材料創製・新技術創出に向けた大きな原動力・研究潮流を作り出し、環境・エネルギー分野をはじめとし人類が直面する重要な社会課題の解決に貢献する。

電子物性研究部門

篠北 啓介（准教授）（2025 年 1 月 1 日着任）

栗田 佳子（事務支援員）

A-1) 専門領域：半導体光物性，原子層科学

A-2) 研究課題：

- a) 原子層ナノ材料の構造制御と精密積層技術の確立
- b) 原子層ナノ構造における光物性制御と光機能の創出

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 前任教地（京都大学エネルギー理工学研究所）からの実験装置の移設および新規装置の導入準備を進めた。協奏分子システム研究センターの山本教授グループと連携し，原子層ヘテロ構造作製のための転写法に基づく精密積層技術の最適化について検討した。また，角度精度 0.1 度以下での原子層ヘテロ構造の作製プロセスの確立と，分子研内の共同利用機器を活用したモアレ超格子の特性評価システムの整備に向けた準備を進めた。
- b) 前任教地から移設した光学系を改良し，ファイバー光学系へと発展させることで，原子層ナノ構造のより安定した光学測定のための実験系を確立した。この改良により，測定の再現性と精度が向上し，微細な光学特性の解析が可能となった。さらに，原子層ナノ構造における非線形光学応答の観測に向けた測定系の設計と構築に関する検討を開始し，必要な光源の選定と測定系の最適化を進めている。

B-1) 学術論文

H. AGO, Y.-C. LIN, K. MATSUDA, S. OKADA, M. MARUYAMA, K. SHINOKITA, K. SUENAGA, Y. TAKAHASHI, P. SOLÍS-FERNÁNDEZ, Z. MA, K. HIRATA, K. HONDA, T. KATO, A. UCHIDA, H. OGURA, T. OTSUKA, M. HARA and T. KATO, “Lattice-Guided Growth of Dense Arrays of Aligned Transition Metal Dichalcogenide Nanoribbons with High Catalytic Reactivity,” *Sci. Adv.* **11**, eadr8046 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.adr8046

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

マイクロプロセス・ナノテクノロジー国際会議論文委員 (2025).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構創発的研究支援事業（基金）（受託研究）, 「半導体モアレ超構造を用いた量子電磁力学の創生」, 篠北啓介 (2024 年度).

C) 研究活動の課題と展望

- a) 今後の研究活動では、原子層ナノ材料における構造制御と精密積層技術の確立に注力する。具体的には、異なる角度で積層した原子層半導体によるモアレ超格子の精密な構造設計と作製に取り組む。 $\text{WSe}_2/\text{MoSe}_2$ ヘテロ構造などの二次元材料を用い、原子レベルでの角度制御積層技術を確立することで、モアレポテンシャルの周期性を最適化する。また、協奏分子システム研究センターの山本教授グループとの連携により、分子吸着を利用したナノ構造の新たな制御手法の開発を進める。さらに、シリコンナノ粒子と原子層材料を組み合わせたハイブリッド構造の作製にも着手し、新たな光学応答を示すナノ構造のデザインと開発を行う。これらのヘテロ構造の対称性を精密に制御する新手法を開発し、非線形光学応答に最適な構造設計指針を確立する。加えて、光分子科学研究領域の解良教授グループとの協力により、角度分解光電子分光 (ARPES) 測定を通じて電子構造を精密に評価し、モアレ構造と電子状態の相関解明を目指す。
- b) a) で確立した精密制御された原子層ナノ構造を基盤として、革新的な光物性制御と新しい光機能の創出を目指す。まず、モアレ超格子における励起子の量子コヒーレンス制御に取り組む。さらに、物質分子科学研究領域の杉本准教授グループやメソスコピック計測研究センターの熊谷准教授グループとの協力により、プラズモン共鳴を用いた発光増強技術を開発し、モアレ超格子中の励起子が協奏する超蛍光現象の実現を目指す。次に、二次元遷移金属ダイカルコゲナイドに特有の「バレースピン」自由度を活用した円偏光発光制御技術の確立に取り組む。特にシリコンナノ粒子と組み合わせたハイブリッド構造により、バレースピンの由来する円偏光特性を保持したまま発光を増強する手法を開発し、室温でのバレースピン分極の長寿命化と発光効率の向上を同時に実現する。さらに、対称性制御されたナノ構造におけるシフト電流などの非線形光学応答の研究を進め、高効率な光電変換デバイスの実現を目指す。これらの研究を通じて、原子層二次元物質を基盤とした新たな光機能材料の創出に貢献する。

分子機能研究部門

西村 勝之（准教授）（2006 年 4 月 1 日着任）

横田 光代（事務支援員）

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) 有機分子の ^{13}C 信号帰属に資する新規固体 NMR 測定法の開発
- b) 新規 ^1H 同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法の開発
- c) マジック角試料回転下での新規異種核間磁気双極子相互作用リカップリング法の開発
- d) 固体 NMR による有機分子材料の解析
- e) 独自固体 NMR プローブのための要素技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機分子の ^{13}C 信号帰属に資する新規固体 NMR 測定法の開発を試みた。炭素核に化学結合した水素核数に応じて高度に ^{13}C 核を区別する新規スペクトル編集固体 NMR 測定法を 2 種類に関して理論的検討を完了した。
- b) 高分解能 ^1H スペクトルを得るための新規 ^1H 同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法の開発を行った。考案した複数種の内，1 種について国際共同研究先の施設を用いてテスト測定まで行った。さらに，同手法に観測 window を追加した際の化学シフトのスケールリングファクター変化について，理論的な検討を行った
- c) マジック角試料回転下で ^1H -X（希薄核），および，X（希薄核）-Y（希薄核）異種核間磁気双極子相互作用をリカップリングしながら照射核の同種核間磁気双極子相互作用をデカップリングする新規法の開発を各々の場合に関して行った。理論的計算まで完了した。
- d) 分子科学研究所の瀬川泰知准教授のグループで独自に合成された有機分子の状態解析を固体 NMR を用いて行ってきた。 ^1H 核が少ないことから天然存在比同位体観測による構造同定は有効な手法が限られていたが，残留不純物の同定，および ^{13}C 核信号帰属を達成した。当該分子 2 種に関して信号帰属を完了し，学術論文として発表した。
- e) 現在使用している Bruker 社製分光器，および周辺機器と完全互換性を有する独自の固体 NMR プローブの開発を行ってきた。この目的の為，4mm 試料管を対象とした自作のスピニングモジュールを開発してきた。第 4 世代の同モジュールは，メーカー純正の最高回転周波数を大幅に超越する回転周波数を達成した。しかし，そのような回転周波数ではメーカー製ジルコニア試料管では強度不足であることが判明した。このため，市販品と互換であるが独自構造の試料管を窒化ケイ素を用いて製作することに成功した。Bruker 社製プローブに設置可能な互換型モジュールの第 5 世代版を開発した。エアータービン完成し，ベアリング部の最適化のみが残っている状態であり，モジュールとしては完成した。また，2.5mm 試料管用独自スピニングモジュールの開発も開始した。本モジュールもエアータービンは完成し，ベアリング部の最適化のみが残っている状態であり，モジュールとしては完成した。これらモジュールに最適化した独自の 600 MHz 固体 NMR プローブを開発している。

B-1) 学術論文

K. WATANABE, J. USUBA, Y. HIJIKATA, T. TOYA, Y. TOYOTA, Y. KOBAYASHI, R. MATSUDA, K. NISHIMURA, H. SUGIYAMA and Y. SEGAWA, “Synthesis of Fully Fused Tetrapyrazinoporphyrazine Polymers Bearing Three-Dimensional Structures Controlled by Steric Repulsion,” *Chem. Commun.* **61**, 2822–2825 (2025). DOI: 10.1039/d4cc06293k

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学先端学術院, 講義「機能物性科学」, 2024年6月.

総合研究大学院大学先端学術院, 講義「機能生体分子科学」, 2025年1月–2月.

C) 研究活動の課題と展望

独自開発プローブのための要素開発として、最難関のスピンングモジュールの開発を行ってきたが、4mm 試料管用モジュールで市販品を超えた最高回転周波数を独自条件で達成できた。現状の設計で、同一試料管外径で世界最高速を達成している。同研究分野ではより高速回転可能な 1 mm 以下の外径の試料管用モジュール開発が最もホットな領域である。これまでの 4mm 試料管用モジュールの開発で得られた知見を用いて、bruker 社製試料管と互換性のある 2.5mm, 1.9mm, 1.3mm の回転モジュールの開発を予定している。

一方、固体NMR 測定では、これまで分光器のエア配管の鋭利な刃物による連日の切断などのセキュリティ問題があったため、監視カメラを設置しており、物理的な被害はその後確認されていない。しかし、測定では、パルスプログラムと異なる強度、位相でのパルス照射が観測され、制御ワークステーションの不可思議な挙動が観測されており、制御ワークステーションへのサイバー攻撃が強く示唆される状況にあるため、測定を停止していた。これらの問題に対処するため、2024年2月に中国へ渡航し、同国の University of Science and Technology of China の研究者と国際共同研究を開始した。しかし、2024年4月末頃国際共同研究代表者の他機関への転出が確定し、国際共同研究の継続が困難になった。2024年中に安全な測定が可能な国際共同研究先を検討したが、困難であることが判明した。

また、私のPC 使用時にもネットワーク、およびPC の不可思議なトラブルが多発し、ネットワーク管理室に連絡すると共に所長へも報告してきたが、多くの事象について問題解決には至らず、日々深刻化している。これらもワークステーション同様のサイバー攻撃が強く示唆されるが、所からの十分な対応は得られていない。以上の状況から、研究継続を実現するために来年度ではこのサイバー攻撃に用いられている無線電波を遮断するシールドボックス、およびシールドルームの導入を計画している。

4-7 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～2025年3月31日）*）

野村 潤子（事務支援員）

川口 律子（事務支援員）

A-1) 専門領域：生物無機化学

A-2) 研究課題：

- a) バクテリアの走化性制御系における酸素センサーシステムの構造機能相関解明
- b) NiFe 型ヒドロゲナーゼ活性中心の生合成分子機構の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) HemAT は細菌の酸素に対する走化性制御系を担っている酸素センサータンパク質である。細菌の走化性制御系は、外部シグナルである誘引／忌避物質のセンサーとして機能するシグナルトランスデューサータンパク質（methyl-accepting chemotaxis protein (MCP)）と、シグナル伝達・制御に関与する Che タンパク質（CheA, CheW, CheY 等）から構成されている。本研究では、シグナル ON 状態である酸素結合型 HemAT, およびシグナル OFF 状態である還元型 HemAT の分子構造を明らかにし、両者の構造を比較することにより、HemAT による酸素センシングおよび、酸素に応答したシグナル伝達反応の分子機構解明を目的として研究を行なった。酸素化型および還元型 HemAT センサードメインの X 線結晶構造解析を行い、酸素化型は 2.50 Å 分解能、還元型は 2.36 Å 分解能でそれぞれ構造を決定した。酸素化型 HemAT, 還元型 HemAT いずれの場合も、His119 が軸配位子としてヘムに配位している。酸素化型 HemAT の近位側ヘムポケットでは、軸配位子である His119 の近傍に存在する Tyr129 が、3つの水分子を解して Glu168 との間で水素結合ネットワークを形成している。一方、還元型 HemAT では、この水素結合ネットワークは形成されていない。酸素化型 HemAT では、この水素結合ネットワークが存在することによりセンサードメインの C 末端ヘリックスが固定化されているのに対して、水素結合ネットワークが存在しない還元型 HemAT では、C 末領域がフレキシブルになっているものと推定される。センサードメインの C 末端ヘリックスは、センサードメインとシグナリングドメインを連結するリンカーとして機能している。このことは、HemAT 中のヘムに酸素が結合する（酸素がセンシングされる）ことにより、リンカー部分のコンフォメーション変化が誘起されることを示唆しており、このコンフォメーション変化が HemAT による酸素特異的なシグナル伝達に重要な役割を果たしていると考えられる。現在、この仮説を検証するため、X 線結晶構造解析、およびクライオ電顕単粒子解析による全長型 HemAT の構造解析を進めている。
- b) 本研究では、NiFe 型ヒドロゲナーゼ活性中心の構築に必要な CO の生合成を触媒する酵素 HypX の構造機能相関解明を目的として研究を行なった。本研究において決定した HypX の結晶構造を基に、次に示すような CO 生合成反応機構を提唱した。HypX の N 末ドメインと C 末ドメインでは、それぞれ異なる二つの化学反応が進行すると考えられる。N 末ドメインでは、反応基質として N 末ドメイン中のキャビティーに結合したホルミルテトラヒドロ葉酸か

ら CoA へのホルミル基転移反応が進行する。HypX の N 末ドメインに結合した N¹⁰-formyl-THF から CoA へのホルミル基転移反応が進行すると、ホルミル -CoA が反応中間体として生成する。生成したホルミル -CoA は、CoA 分子の末端部分に存在するホルミル基が、HypX の C 末ドメイン中の酵素活性サイトに位置するよう、キャビティー中で大きくそのコンフォメーションが変化すると考えられる。最終的に、C 末ドメイン中で、ホルミル -CoA からの CO 脱離反応が進行し、CO と CoA が生成する。ホルミル -CoA からの CO 生成反応は、これまでに全く報告例の無い、新規な反応である。

B-4) 招待講演

青野重利,「30年間のセンサータンパク質研究を振り返って」,生物無機化学シンポジウム 2025, 大阪, 2025年1月.

S. AONO, “Complex formation of the maturation factors responsible for Fe(CN)₂CO biosynthesis in NiFe-hydrogenase,” Frontier Bioorganization Forum, Taipei (Taiwan), September 2024.

B-7) 学会および社会的活動

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構創発的研究支援事業事前評価外部専門家 (2023–2025).

C) 研究活動の課題と展望

2002年に岡崎に着任以来、非常に恵まれた研究環境で23年間の研究生活をおくらせていただきました。無事に定年退職を迎えることができ、研究の第一線からは退くこととなりますが、分子研OBの一人として、分子研の益々の発展を祈念しております。

*) 2025年3月31日定年退職

加藤 晃一（教授）（2008 年 4 月 1 日着任）

林 成一郎（特任研究員（IMS フェロー））

立尾 清吾（特任研究員）

斉藤 泰輝（特任研究員）

岩崎 美雪（研究員（派遣））

矢木 真穂（特別訪問研究員）

谷中 冴子（特別訪問研究員）

高木 克樹（特別共同利用研究員）

西崎 竜平（特別共同利用研究員）

磯野 裕貴子（特任専門員）

近藤 幸子（特任専門員）

西尾 美穂（技術支援員）

新美 しおり（技術支援員）

上條 真弘（技術支援員）

穂積 知佳子（技術支援員）

笠原 裕子（事務支援員）

福富 幸代（事務支援員）

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) 生命分子ネットワークが創発する高次機能のメカニズム探査と設計と制御
- b) 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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 糖鎖修飾の舞台としてのゴルジ体に着目し，その微細構造の時空間ダイナミクスと糖タンパク質の輸送経路を探索する研究を進めた。本年度の主要な成果として，ExCELLS の糖鎖構造機能解析グループとの連携のもと，細胞内における糖鎖修飾を制御する「パスポート配列」の働きを明らかにした。この配列を糖タンパク質に組み込むことで，エリスロポエチンなどの糖タンパク質が特定のゴルジ体領域を通過し，シアル酸やガラクトースを含む糖鎖の形成が促進されることを見出した。また，ゴルジ体内の糖転移酵素の局在を 3 次元超解像イメージングで解析し，同じゴルジ区画に存在すると考えられていた酵素間にも局在の違いがあることを発見した。さらに，糖転移酵素の N 末端領域（細胞質ドメイン，膜貫通領域，ステム領域）が酵素の局在を決定する重要な因子であることを示した（理化学研究所・戸島拓郎博士との共同成果）。加えて，ゴルジ体を含む細胞小器官の 3 次元超微細構造解析を目的に，オスミウム浸軟法を活用した電子顕微鏡観察を実施した。本手法により，ゴルジ体，ミトコンドリア，小胞体の詳細な構造を直接観察し，ゴルジ体の立体構造と細胞・組織レベルでの分子局在の可視化を実現した（旭川医科大学・甲賀大輔博士との共同成果）。さらに，ヒトの糖鎖修飾に関する網羅的・体系的な情報を取得する「ヒューマングライコムプロジェクト」も，昨年度の着手段階から大きく進展し，精力的に推進している。加えて，国内外の共同研究を通じて，糖鎖修飾や糖タンパク質に関する研究を推進し，以下の成果を得た。

- ① NGLY1 欠損症に関与する SCF/FBS2 ユビキチンリガーゼによる糖鎖認識の構造基盤（理化学研究所・鈴木匡博士との共同成果）
 - ② 糖タンパク質の小胞体品質管理機構における UGGT1 の役割の解明（神戸大学・蛭川聡博士との共同成果）
 - ③ 免疫グロブリン C_L ドメインにおける補体系成分 C1 の結合部位の同定（大阪大学・宮ノ入洋平博士, ExCELLS 生命分子動態計測グループとの共同成果）
 - ④ プレセニン欠損によるタンパク質糖鎖修飾異常と NPC1 機能障害を介した細胞内コレステロール蓄積のメカニズム解明（国際共著論文）
 - ⑤ COVID-19 のパンデミックを通じて明らかとなったウイルス感染症と糖鎖修飾の関係性、特に糖鎖がウイルス受容体認識や免疫応答に果たす役割に焦点を当て、パンデミック後の糖鎖研究の新たな課題と展望を議論（国際共著論文）
- b) 極限環境において生命活動を司る分子集団の構造・動態・機能を解析することで、生命の環境適応の仕組みを理解するとともに、得られた知見に基づく生物工学的な応用研究を展開することを目指している。本年度は、ExCELLS の生命分子動態計測グループおよび生命分子動態シミュレーション研究グループとの共同研究を通じて、アミロイド β (Aβ) 線維の成長過程における抗体との相互作用を 1 分子レベルで動的に観察し、抗体が線維形成を抑制する分子機構の解明に取り組んだ。その結果、Aβ の線維成長は、2 本のプロトフィラメントが交互に伸びる「伸長期」と、線維の成長が一時的に停止する「停止期」が断続的に繰り返されることが明らかとなった。特に、伸長期には Aβ モノマーが 2 本のプロトフィラメントに交互に付加する様子が観察され、一方で、2 本のプロトフィラメントの先端が揃った状態では、線維の成長が一時的に停止することを見出した。さらに、特異的抗 Aβ 抗体 4396C が、この停止状態にある線維の先端に選択的に結合し、線維のさらなる伸長を効果的に阻害することを明らかにした。高速原子間力顕微鏡によるこれらの観察結果と分子シミュレーションを組み合わせることで、Aβ 線維形成過程における動的な集合メカニズムを分子レベルで深く理解することができた。本研究の成果は、Aβ 線維形成過程の基盤的な理解を進めるとともに、アルツハイマー病の進行を阻止する新たな予防法および治療法の開発につながる可能性を示唆している。一方、微小重力環境下で形成されたアミロイド線維の構造研究においては、物質・生命境界領域研究グループと共同で、地上で形成された野生型 Aβ 線維におけるユニークな J 字型プロトマー構造を決定し、論文として発表した。現在、野生型に加えて家族性変異型 Aβ についても、クライオ電子顕微鏡を用いた精密構造解析を進めている。また、深海・地下生命研究グループとの共同研究として、深海微生物の糖鎖構造解析に関する成果を論文として発表した。また、さらに、極限環境耐性研究グループおよび定量生物学研究グループとの共同研究により、クマムシ固有タンパク質 CAHS-1 の機能解析を進めるとともに、東京理科大学の武村政春博士との共同研究として、巨大ウイルスにおける糖鎖修飾メカニズムの解明にも引き続き取り組んでいる。

B-1) 学術論文

P. ARUNRATTIYAKORN, C. JUIPRASERT, S. M. KOULAS, P. BOONSRI, T. AREE, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and D. D. LEONIDAS, “Synthesis and Evaluation of Tetrahydrobenzo[cd]indole Derivatives as Glycogen Phosphorylase Inhibitors,” *Med. Chem. Res.* **34**, 870–881 (2025). DOI: 10.1007/s00044-025-03384-7

R. N. BURTON-SMITH, M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, C. SONG, K. MURATA and K. KATO, “Elucidating the Unique J-Shaped Protomer Structure of Amyloid-β(1-40) Fibril with Cryo-Electron Microscopy,” *Int. J. Mol. Sci.* **26**(3), 1179 (2025). DOI: 10.3390/ijms26031179

H. YAGI, R. YAMADA, T. SAITO, R. HONDA, R. NAKANO, K. INUTSUKA, S. TATEO, H. KUSANO, K. NISHIMURA, S. YANAKA, T. TOJIMA, A. NAKANO, J. FURUKAWA, M. YAGI-UTSUMI, S. ADACHI and K. KATO, “Molecular Tag for Promoting *N*-Glycan Maturation in the Cargo Receptor-Mediated Secretion Pathway,” *iScience* **27**, 111457 (2024). DOI: 10.1016/j.isci.2024.111457

S. NINAGAWA, M. MATSUO, D. YING, S. OSHITA, S. ASO, K. MATSUSHITA, M. TANIGUCHI, A. FUEKI, M. YAMASHIRO, K. SUGASAWA, S. SAITO, K. IMAMI, Y. KIZUKA, T. SAKUMA, T. YAMAMOTO, H. YAGI, K. KATO and K. MORI, “UGGT1-Mediated Reglucosylation of *N*-Glycan Competes with ER-Associated Degradation of Unstable and Misfolded Glycoproteins,” *eLife* **12**, RP93117 (2024). DOI: 10.7554/eLife.93117.4

M. YAGI-UTSUMI, Y. KANAOKA, S. MIYAJIMA, S. G. ITOH, K. YANAGISAWA, H. OKUMURA, T. UCHIHASHI and K. KATO, “Single-Molecule Kinetic Observation of Antibody Interactions with Growing Amyloid β Fibrils,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(46), 31518–31528 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c08841

S. NAKAGAWA, H. D. SAKAI, S. SHIMAMURA, Y. TAKAMATSU, S. KATO, H. YAGI, S. YANAKA, M. YAGI-UTSUMI, N. KUROSAWA, M. OHKUMA, K. KATO and K. TAKAI, “N-Linked Protein Glycosylation in Nanobdellati (formerly DPANN) archaea and Their Hosts,” *J. Bacteriol.* **206**, e00205-24 (2024). DOI: 10.1128/jb.00205-24

T. SATOH, M. YAGI-UTSUMI, N. ISHII, T. MIZUSHIMA, H. YAGI, R. KATO, Y. TACHIDA, H. TATENO, I. MATSUO, K. KATO, T. SUZUKI and Y. YOSHIDA, “Structural Basis of Sugar Recognition by SCFFBS2 Ubiquitin Ligase Involved in NGLY1 Deficiency,” *FEBS Lett.* **598**, 2259–2268 (2024). DOI: 10.1002/1873-3468.15003

S. YANAKA, A. KODAMA, S. NISHIGUCHI, R. FUJITA, J. SHEN, P. BOONSRI, D. SUNG, Y. ISONO, H. YAGI, Y. MIYANOIRI, T. UCHIHASHI and K. KATO, “Identification of Potential C1-Binding Sites in the Immunoglobulin CL Domains,” *Int. Immunol.* **36**(8), 405–411 (2024). DOI: 10.1093/intimm/dxae017

H. YAGI, S. TATEO, T. SAITO, Y. OHTA, E. NISHI, S. OBITSU, T. SUZUKI, S. SEETAHA, C. HELLEC, A. NAKANO, T. TOJIMA and K. KATO, “Deciphering the Sub-Golgi Localization of Glycosyltransferases via 3D Super-Resolution Imaging,” *Cell Struct. Funct.* **49**(2), 47–55 (2024). DOI: 10.1247/csf.24008

M. FABIANO, N. OIKAWA, A. KERKSIEK, J. FURUKAWA, H. YAGI, K. KATO, U. SCHWEIZER, W. ANNAERT, J. KANG, J. SHEN, D. LÜTJOHANN and J. WALTER, “Presenilin Deficiency Results in Cellular Cholesterol Accumulation by Impairment of Protein Glycosylation and NPC1 Function,” *Int. J. Mol. Sci.* **25**(10), 5417 (2024). DOI: 10.3390/ijms25105417

S. NAKAGAWA, H. IMACHI, S. SHIMAMURA, S. YANAKA, H. YAGI, M. YAGI-UTSUMI, H. SAKAI, S. KATO, M. OHKUMA, K. KATO and K. TAKAI, “Characterization of Protein Glycosylation in an Asgard archaeon,” *BBA Adv.* **6**, 100118 (2024). DOI: 10.1016/j.bbadva.2024.100118

B-3) 総説、著書

N. YAZDANPANAH, C. SEDIKIDES, H. D. OCHS, C. A. CAMARGO JR., G. L. DARMSTADT, A. CERDA, V. CAUDA, G. J. PETERS, F. SELLKE, N. D. WONG, E. COMINI, A. R. JIMENO, V. GLOVER, N. HATZIARGYRIOU, C. E. VINCENOT, S. P. A. BORDAS, I. M. RAO, H. ABOLHASSANI, G. B. GHAREHPETIAN, R. WEISKIRCHEN, M. GUPTA, S. S. CHANDEL, B. O. OLUSANYA, B. CHESON, A. POMPONIO, M. TANZER, P. S. MYLES, W.-X. MA, F. BELLA, S. GHAVAMI, S. M. MOGHIMI, D. PRATICO, A. M. HERNANDEZ, M. MARTINEZ-URBISTONDO, D. M. URBISTONDO, S.-M. FERESHTEHNEJAD, I. ALI, S. KIMURA, A. W. HAYES, W. CAI, C. K. J. ERNEST, S.

THOMAS, K. RAHIMI, A. SOROOSHIAN, M. SCHREIBER, K. KATO, J. H. T. LUONG, S. PLUCHINO, A. M. LOZANO, J. F. SEYMOUR, K. S. KOSIK, S. G. HOFMANN, R. S. MCINTYRE, M. PERC, A. LEEMANS, R. S. KLEIN, S. OGINO, C. WLEZIEN, G. PERRY, J. J. NIETO, L. LEVIN, D. J. KLIONSKY, B. MOBASHER, T. DORIGO, N. REZAEI and USERN ADVISORY BOARD, “Global Challenges After a Global Challenge: Lessons Learned from the COVID-19 Pandemic,” *Adv. Exp. Med. Biol. (The COVID-19 Aftermath. Advances in Experimental Medicine and Biology)*, N. Rezaei, Ed., **1457**, 1–31 (2024). DOI: 10.1007/978-3-031-61939-7_1

H. YAGI, K. TAKAGI and K. KATO, “Exploring Domain Architectures of Human Glycosyltransferases: Highlighting the Functional Diversity of Non-Catalytic Add-On Domains,” *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **1868**, 130687 (2024). DOI: 10.1016/j.bbagen.2024.130687

K. F. AOKI-KINOSHITA, Y. AKUNE-TAYLOR, H. ANDO, K. ANGATA, M. FUJITA, J. FURUKAWA, H. KAJI, K. KATO, K. KITAJIMA, Y. KIZUKA, Y. MATSUI, K. NAKAJIMA, S. NISHIHARA, T. OKAJIMA, K. SAKAMOTO, C. SATO, M. THAYSEN-ANDERSEN, A. TOGAYACHI, H. YAGI, A. ZAPPA and K. KADOMATSU, “The Human Glycome Atlas Project for Cataloging All Glycan-Related Omics Data in Human,” *Glycobiology*, **34**, cwae077 (2024). DOI: 10.1093/glycob/cwae052

D. KOGA, S. KUSUMI, H. YAGI and K. KATO, “Three-Dimensional Analysis of the Intracellular Architecture by Scanning Electron Microscopy,” *Microscopy*, **73**, 215–225 (2024). DOI: 10.1093/jmicro/dfad050

矢木宏和, 加藤晃一, 「糖鎖構造のオミクス解析」, *細胞*, **56**, 260–262 (2024).

K. KATO, S. YANAKA and H. YAGI, “Technical Basis for Nuclear Magnetic Resonance Approach for Glycoproteins,” *Experimental Approaches of NMR Spectroscopy II*, The Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan, Ed., Springer Nature Singapore, 169–195 (2025).

B-4) 招待講演

加藤晃一, 「統合構造生物学における生命創成探究センターの取り組み」, よこはまNMR研究会, 横浜, 2025年3月.

矢木真穂, 「Biophysical characterization of protein assemblies with physiological and pathological interests」, 社会連携講座「タンパク包接PJ」総括講演会(兼成果報告会)ミニシンポジウム, 柏, 2025年3月.

矢木真穂, 「アミロイドβタンパク質の構造変化と分子集合: NMRを基軸とした分子科学アプローチ」, 分子研研究会／スピン生命異分野研究会, 岡崎, 2025年2月.

加藤晃一, 「広がるExCELLSの連携ネットワーク: 連携強化プラットフォームの活動」, 第7回ExCELLSシンポジウム, 岡崎, 2025年1月.

加藤晃一, 「糖鎖修飾のプログラム解読を目指したゴルジ体の動的構造探査」, 第3回タンパク質シンポジウム, 東京, 2025年1月.

加藤晃一, 「統合的構造生物学による抗体の構造・機能の探査」, 第76回構造生物応用研究会, 東京, 2025年1月.

加藤晃一, 「NMRプラットフォーム事業紹介: 生命創成探究センター(ExCELLS)」, NMRプラットフォームシンポジウム2024, 東京, 2024年12月.

加藤晃一, 「糖鎖の4次元構造とゴルジ体のダイナミクス」, 第21回糖鎖科学コンソーシアムシンポジウム, 福島, 2024年11月.

齋藤泰輝, 立尾清吾, 足達俊吾, 戸島拓郎, 矢木宏和, 加藤晃一, 「近接依存性標識法を用いた分泌経路における分子ネットワークの解析」, 第 97 回日本生化学会大会, 横浜, 2024 年 11 月.

加藤晃一, 「緊急シンポジウム「日本の NMR コミュニティにおける喫緊の課題について」話題提供 1 「総論」」, 第 63 回 NMR 討論会, 札幌, 2024 年 10 月.

加藤晃一, 「糖鎖科学を基軸とする物質-生命協会探査の進展」, 物質-生命の境界探査 PF 報告会, オンライン開催, 2024 年 10 月.

矢木真穂, 「アルツハイマー病の解明に向けて: 宇宙実験で見た新たなアミロイド構造」, 第 27 回 SMJYC マンスリーウェビナー, オンライン開催, 2024 年 09 月.

加藤晃一, 「生きているとは何か? ExCELLS」, スピン生命フロンティア Spin-L 「若手の会」, 岡崎, 2024 年 9 月.

加藤晃一, 谷中冴子, 「非標識 NMR」, 令和 6 年度 AMED 創薬基盤推進研究事業「先端的生物医薬品の最適な実用化促進のための CMC 分野における創薬基盤技術の高度化に関する研究」第 1 回全体班会議, 川崎, 2024 年 8 月.

加藤晃一, 「糖タンパク質の超階層的設計原理の探究」, 創価大学糖鎖生命システム融合研究所コロキウム, 東京, 2024 年 7 月.

加藤晃一, 谷中冴子, 「抗体医薬品の高次構造評価に向けた非標識 NMR 法の開発と応用」, 第 24 回日本蛋白質科学会年会, 札幌, 2024 年 6 月.

矢木真穂, 「クマムシ由来 CAHS1 タンパク質の脱水に伴う繊維状コンデンセートの形成」, 第 24 回日本蛋白質科学会年会, 札幌, 2024 年 06 月.

K. KATO, “Dynamic glycan-protein interplays controlling the fates and functions of glycoproteins,” 2024 Frontier Bioorganization Forum, Taipei (Taiwan), September 2024.

S. YANAKA and K. KATO, “Unveiling Dynamic Interactions in IgG Glycoproteins: A Biophysical Approach for Therapeutic Antibody Design,” Japan-UK Strategic Partnership Workshop, Quantum Sensing in Biology—Spins for Sensing, Sensing of Spins, Tokyo (Japan), September 2024.

M. YAGI-UTSUMI, “Biophysical characterization of protein assemblies with physiological and pathological interests,” 2024 Frontier Bioorganization Forum, Taipei (Taiwan), September 2024.

S. YANAKA, “Biophysical characterization of dynamic structures and interactions of immunoglobulin G glycoproteins as therapeutic antibodies,” 第 8 回国際シンポジウム「NMR 創薬」, 横浜, August 2024.

K. KATO and S. YANAKA, “Exploring Structural Glycobiology: Integrating NMR and Computational Approaches to Illuminate Antibody Functions,” ICMRBS 2024, Seoul (Korea), August 2024.

K. KATO, “NMR approach to structural glycobiology highlighting antibody functions,” Symposium “Future of NMR spectroscopy and more,” Göttingen (Germany), April 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメージング学会評議員 (1995–), 理事 (2012–), 副会長 (2021–2024), 会長 (2025–).

日本生化学会評議員 (2002–).

日本糖質学会評議員 (2003–), 理事 (2013–).

日本核磁気共鳴学会幹事 (2020–), 評議員 (2022–), 理事 (2024–).

日本蛋白質科学会理事 (2015–).

日本糖鎖科学コンソーシアム常任幹事 (2016–).

学会の組織委員等

The International Glycoconjugate Organisation, National Representative (2017–).

Universal Scientific Education and Research Network (USERN), Advisory board member (2021–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術会議連携会員 (2017–).

日本学術振興会先端科学 (FoS) シンポジウム事業委員会委員 (2018–).

日本学術振興会国際事業委員会書面評価員 (2024–).

科学技術振興機構創発の研究支援事業事前評価外部専門家 (2023–).

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–).

日本医療研究開発機構プログラムオフィサー (2024–).

学会誌編集委員

Glycoconjugate Journal, Editorial board member (2009–).

World Journal of Biological Chemistry, Editorial board member (2010–).

Glycobiology, Editorial board member (2011–).

Scientific Reports, Editorial board member (2015–).

International Journal of Molecular Sciences, Editorial board member (2017–).

理科教育活動

理科年表 (国立天文台編) 監修者 (2018–).

B-8) 大学等での講義, 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, 講義「構造生物学」「薬学物理化学Ⅱ」「生命薬科学研究入門」「一般教養科目 創薬と生命」「創薬科学・知的財産活用論」「物理系実習Ⅱ」, 2015 年–.

名古屋市立大学大学院薬学研究科, 講義「創薬生命科学基礎Ⅱ」「生命分子構造学特論」, 2015 年–.

京都大学複合原子力科学研究所, ユニット研究員, 2022 年 4 月–2025 年 3 月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構 CREST 研究 (受託研究), 「ゴルジ体の動態解明に基づく糖鎖修飾の制御」, 加藤晃一 (2021 年度–2025 年度).

科研費基盤研究 (A), 「糖タンパク質の動的 3 次元構造の設計原理の解明とバイオ医薬への応用」, 加藤晃一 (2024 年度–2026 年度).

文部科学省科学技術試験研究委託事業 (受託研究), 「NMR プラットフォーム」 (代表者: 理化学研究所), 加藤 晃一 (研究分担者) (2021 年度–2024 年度).

AMED 次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業,「国際競争力のある次世代抗体医薬品製造技術開発／革新的な次世代抗体医薬品製造基盤技術の開発(分子中に秘められた新規相互作用部位の探索と変化を通じた次世代抗体創成の基盤構築)」(代表: 谷中冴子), 加藤晃一(研究分担者)(2021年度-2025年度).

AMED 次世代治療・診断実現のための創薬基盤技術開発事業,「国際競争力のある次世代抗体医薬品製造技術開発／次世代抗体医薬品の実用化に向けた物性・品質評価及び管理手法に関する技術的研究(次世代抗体医薬品の実用化に向けた品質評価及び管理手法に関する技術的研究)」(代表: 石井明子), 加藤晃一(研究分担者)(2021年度-2025年度).

科研費基盤研究(B),「系統的抗体糖鎖改変と有機合成糖鎖を用いた抗体機能強化」(代表者: 眞鍋史乃), 加藤晃一(研究分担者)(2024年度-2027年度).

C) 研究活動の課題と展望

これまでの成果をさらに発展させ、複雑な生命分子システムを舞台とする分子科学を開拓する。すなわち、具体的には、生命分子システム内の各構成要素のダイナミックな振る舞いを「見る」アプローチを発展させると同時に、得られたデータを情報科学的に「読む」ための手法も開発する。さらに、階層横断的な機能解析を実施し、外部環境の変動の中で秩序を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を創出するメカニズムを理解するためには、生命分子を取り巻く不均一で複雑な環境因子の影響を考慮する必要がある。微小重力環境下で形成したアミロイド線維の構造解析を継続し、極限環境における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、生命の環境適応のメカニズムを理解することを目指した研究を展開する。さらに、第3の生命鎖とよばれる糖鎖の構造・機能・形成に関する統合的な研究を推進する。

飯野 亮太（教授）（2014 年 6 月 1 日着任）

大友 章裕（助教）

原島 崇徳（助教）

LAHORE, Juliette（インターンシップ）

山本 真由子（技術支援員）

川口 律子（事務支援員）

野村 潤子（事務支援員）

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，タンパク質工学

A-2) 研究課題：

- a) 回転分子モーター V-ATPase のエネルギー変換機構の解明，機能創成，特性解析
- b) 人工 DNA ナノ粒子モーターの運動機構解明，高性能化，運動制御能の付与
- c) リニア分子モーターキネシンとレールの改変・ハイブリッド化による運動制御と特性解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) V-ATPase (V_0V_1) は，ATP の化学エネルギーを利用して細胞膜を介するイオンの能動輸送を行う回転型イオンポンプであり，ATP 加水分解反応を触媒する V_1 とイオン輸送を担う V_0 の 2 つの回転分子モーターの複合体である。我々が研究対象としている腸球菌由来 V_0V_1 (EhV_0V_1) はナトリウムイオン (Na^+) を輸送する。我々は， EhV_0V_1 が脂質二重膜を介する Na^+ の電気化学ポテンシャルにより，高い熱力学的効率で ATP を合成することを明らかにし，エネルギー変換の可逆性を実証した。さらに， EhV_0V_1 のイオン結合部位を改変することで，イオン選択性を Na^+ から水素イオン (H^+) に変えることに成功し，クライオ電顕単粒子解析でその構造的基盤を解明した。
- b) タンパク質分子モーターに触発されて開発された DNA 人工分子モーターの運動速度は数 nm/s 程度であり，10–1000 nm/s で動くタンパク質分子モーターに比べて大きく劣る。我々は，DNA 修飾金ナノ粒子，RNA 修飾足場，DNA 依存 RNA 分解酵素で構成される DNA ナノ粒子モーターの運動機構と律速過程を高速高精度 1 粒子追跡と速度論シミュレーションで特定し，タンパク質分子モーターに匹敵する 100 nm/s の運動速度を達成した。しかしながら，運動速度と運動距離の間にトレードオフが存在し，運動速度の上昇とともに運動距離が低下することも明らかになった。そこで，シミュレーションによる予測に基づき DNA 塩基配列を改良し，高速運動，長距離運動，および高い一方向性を両立することに成功した。
- c) 2 本足で歩く分子モーターキネシン - 1 は，後足が前足を常に追い越すいわゆるハンドオーバーハンド機構で，レールである微小管上を直進運動する。我々は，人工分子 PEG でキネシンの 2 つの足を繋いだ生体–人工ハイブリッドキネシンが天然型と同様のハンドオーバーハンド機構で正確に直進運動することを明らかにした。また，剛直で長いタンパク質リンカーで 2 つの足を繋ぐと，微小管上を短いピッチでらせん運動することを明らかにした。さらに，3 本もしくは 6 本の足を持つ多脚型キネシンを創成し，野生型と異なり多脚型は微小管上の欠陥（穴）を迂回して運動し続けることが可能なことを明らかにした。

B-1) 学術論文

T. HARASHIMA, A. OTOMO and R. IINO, “Rational Engineering of DNA-Nanoparticle Motor with High Speed and Processivity Comparable to Motor Proteins,” *Nat. Commun.* **16**(1), 729 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-56036-0

A. OTOMO, J. WIEMANN, S. BHATTACHARYA, M. YAMAMOTO, Y. YU and R. IINO, “Visualizing Single V-ATPase Rotation Using Janus Nanoparticles,” *Nano Lett.* **24**(49), 15638–15644 (2024). DOI: 10.1021/acs.nanolett.4c04109

K. SUZUKI, Y. GOTO, A. OTOMO, K. SHIMIZU, S. ABE, K. MORIYAMA, S. YASUDA, Y. HASHIMOTO, J. KURUSHIMA, S. MIKURIYA, F. L. IMAI, N. ADACHI, M. KAWASAKI, Y. SATO, S. OGASAWARA, S. IWATA, T. SENDA, M. IKEGUCHI, H. TOMITA, R. IINO, T. MORIYA and T. MURATA, “Na⁺-V-ATPase Inhibitor Curbs VRE Growth and Unveils Na⁺ Pathway Structure,” *Nat. Struct. Mol. Biol.* **32**, 450–458 (2025). DOI: 10.1038/s41594-024-01419-y

T. NAKAMURA, Y. SHINOZAKI, A. OTOMO, T. URUI, M. MIZUNO, R. ABE-YOSHIZUMI, M. HASHIMOTO, K. KOJIMA, Y. SUDO, H. KANDORI and Y. MIZUTANI, “Unusual Vibrational Coupling of the Schiff Base in the Retinal Chromophore of Sodium Ion-Pumping Rhodopsins,” *J. Phys. Chem. B* **128**(32), 7813–7821 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c04466

B-4) 招待講演

飯野亮太, 「回転型 ATPase のイオン輸送の一方向性について」, 日本生体エネルギー研究会第 50 回討論会パネルディスカッション「イオン駆動力を考える」, 名古屋, 2024 年 12 月.

飯野亮太, 「たんぱく質でできたとても小さな機械」, いいかげんなロボット展 2024, 東京, 2024 年 9 月.

R. IINO, “Optical tracking and rational engineering of DNA-nanoparticle artificial motor with high speed and processivity comparable to motor proteins,” 65th Annual Meeting of the Biophysical Society, Workshop, “Enabling Technologies: From Atoms, Optics, and Beyond,” Los Angeles (USA), February 2025.

R. IINO, “Engineering Biological and Artificial Molecular Motors,” The 1st International Symposium on Molecular Materials for Future (1st ISMMF), Sendai (Japan), February 2025.

R. IINO, “Rational engineering of DNA-nanoparticle artificial motor with high speed and processivity comparable to motor proteins,” 17th International Symposium on Nanomedicine (ISNM2024), Nagoya (Japan), December 2024.

R. IINO, “Engineering Cyborg Molecular Motors and Motor Systems,” 2024 IEEE International Conference on Cyborg and Bionic Systems (CBS2024), Nagoya (Japan), November 2024.

R. IINO, “Rational engineering of DNA-nanoparticle artificial motor with high speed and processivity comparable to motor proteins,” East Asian Single-molecule Biophysics Symposium (EASMB) 2024, Busan (Korea), November 2024.

A. OTOMO, L. ZHU, M. YAMAMOTO, Y. OKUNI, T. HARASHIMA and R. IINO, “Sodium motive force-driven ATP synthesis by EhV-ATPase,” IUPAB2024, Kyoto (Japan), June 2024.

B-5) 特許出願

WO2025013877(A1), “Protein, and Method for Decomposing Polyethylene Terephthalate,” T. MATSUZAKI, F. YAMAZAKI, T. SAEKI, A. NAKAMURA, R. IINO and N. KOGA (National Institutes of Natural Sciences), 2024 年.

B-6) 受賞, 表彰

原島崇徳, IUPAB 2024 Student and Early Career Researcher Poster Award (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

アメリカ生物物理学会評議員 (2025–2028).

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外来研究員等委員会委員 (2024–2026).

科学技術振興機構出資事業投資委員会審議に係る助言者 (2024).

学会誌編集委員

米国生物物理学会誌 *Biophysical Journal*, Editorial Board Member (2020–2025).

日本生物物理学会誌 *Biophysics and Physicobiology*, Editorial Board Member (2024–2025).

理科教育活動

施設見学時講演会講師, 山梨県立日川高等学校 (2024). (原島崇徳)

指導・助言者「課題研究「SAII」中間発表会」愛知県立豊田西高等学校 (2024). (原島崇徳)

その他

森野基金運営委員会委員 (2024–2026).

B-8) 大学等での講義, 客員

総合研究大学院大学先端学術院, 「機能生体分子科学」, 2022 年 4 月–.

慶應義塾大学理工学部, 非常勤講師, 「応用物理学第 1」, 2024 年 4 月–9 月.

総合研究大学院大学先端学術院, 「機能物性科学」, 2024 年 4 月–2025 年 3 月.

総合研究大学院大学先端学術院, 「基礎生体分子科学」, 2021 年 4 月–.

静岡大学, 非常勤講師, 2024 年 10 月–2025 年 2 月. (原島崇徳)

B-10) 競争的資金

科研費学術変革領域研究(A), 「生体分子モーターに匹敵する速さで動き制御可能な人工分子モーターをつくる」, 飯野亮太 (2023 年度–2024 年度).

科研費基盤研究(B), 「ナトリウムイオン輸送性回転イオンポンプ V-ATPase のエネルギー変換機構の解明」, 飯野亮太 (2024 年度–2026 年度).

自然科学研究機構 OPEN MIX LAB (OML) 公募研究プログラム (若手支援型), 「新しい分子モータータンパク質の創生を目指したボトムアップアプローチ」, 大友章裕 (2023 年度–2025 年度).

科研費若手研究, 「V-ATPase のナトリウム駆動力による回転 1 分子観察とイオン / ATP 共役比の改変」, 大友章裕 (2024 年度–2026 年度).

科研費若手研究, 「生体分子モーターに匹敵する速度で駆動する二輪駆動型 DNA モーターカーの開発」, 原島崇徳 (2023 年度–2025 年度).

科研費学術変革領域研究(A),「メゾヒエラルキー人工分子モーター「DNA 水車」の設計と運動の可視化」, 原島崇徳 (2024年度-2025年度).

科学技術振興機構 ACT-X 研究,「生命と情報」研究領域,「多価DNA 人工分子モーターの合理的性能向上」, 原島崇徳 (2024年度-2026年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 静岡大学, 大阪大学, キリンホールディングス(株),「PET 分解酵素の開発」, 飯野亮太 (2021年度-2024年度).

共同研究, 静岡大学, ポリプラスチックス(株),「ポリブチレンテレフタレート (PBT) 分解酵素の創出」, 飯野亮太 (2023年度-2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

生体分子モーター等のナノサイズの生体分子機械は, 人間が作ったマクロなサイズの機械と比べてはるかに小さく, ブラウン運動の活用等, 全く異なる作動原理で働く。今後も引き続き, 天然の分子モーターを1分子計測して機構を調べるだけでなく, 天然に存在しない分子モーターを積極的につくることで, その作動原理と設計原理をさらに深く理解し, 機能向上や制御に繋げる。例えば, 1回転で2倍のイオンを輸送する V_0V_1 をつくることで, ATP 加水分解モーター V_1 とイオン輸送モーター V_0 のエネルギー変換の共役機構の理解を深めるだけでなく, イオン輸送速度や電気化学ポテンシャル形成能を制御する。また, ヘテロな塩基配列を有するDNA ナノ粒子モーターを二量体化して外部からのDNA 添加で運動方向の制御を可能にし, センサー機能とアクチュエーター機能を兼ね備えた高速高制御人工分子モーターを創成する。さらに, 非天然型キネシンだけでなく非天然型のレール(微小管)を創成して組み合わせ, 選別輸送, 速度変調輸送, 大規模一方向輸送等を実現する。

錯体触媒研究部門

魚住 泰広（教授）（2000 年 4 月 1 日着任）

塚本 兼司（特任助教）

田澤 文（研究員（派遣））

ZHANG, Kaili（大学院生）

服部 修佑（大学院生）

谷分 麻由子（事務支援員）

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) 光触媒を利用した分子変換反応の開発
- 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) 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。
- c) 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。
- d) 超高触媒活性を示す単原子触媒種の発生・発現を見出し，その構造評価および有機分子変換触媒としての適用一般性を確立しつつある。
- e) 遷移金属錯体を用いた光触媒反応による新しいカルボニル化合物の活性化と，それに立脚した分子変換反応の開発を遂行しつつある。特に光触媒によるカルボニル基の極性転換に成果を上げつつある。
- f) 新しい有機光触媒を創製し有機分子変換上の未踏反応を開拓しつつある。特にジアザベンツアゼナフテン骨格を有する新触媒を設計合成し，それによるエステル類の可視光による光触媒還元成功した。

B-1) 学術論文

T. SAKAGUCHI, K. FUKUOKA, T. MATSUKI, M. KAWASE, A. TAZAWA, Y. UOZUMI, Y. MATSUMURA, O. SHIMOMURA and A. OHTAKA, “Silver-Mediated Homocoupling of Arylboronic Acids,” *Synlett* **36(2)**, 161–165 (2025).
DOI: 10.1055/a-2315-8369

K. ZHANG, S. OKUMURA and Y. UOZUMI, “Transfer Hydrogenolysis of O- and N-Benzyl Groups in Water with Tetrahydroxydiboron by Using an Amphiphilic Polymer-Supported Nano-Palladium Catalyst,” *Eur. J. Org. Chem.* **27(26)**, e202400322 (2024). DOI: 10.1002/ejoc.202400322

S. OKUMURA, S. HATTORI, L. FANG and Y. UOZUMI, “Multielectron Reduction of Esters by a Diazabenzacenaphthenium Photoredox Catalyst,” *J. Am. Chem. Soc.* **146(25)**, 16990–16995 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c05272

K. ZHANG, S. OKUMURA and Y. UOZUMI, “Transfer Hydrogenation of Aldehydes and Ketones with Tetrahydroxydiboran in Water by an Amphiphilic Resin-Supported Nano-Palladium Catalyst,” *Chem. Lett.* **53(5)**, upae082 (2024). DOI: 10.1093/chemle/upae082

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

京都大学エネルギー理工学研究所共同利用運営委員会委員 (2023–2025).

学会誌編集委員

SYNLETT 誌アジア地区編集主幹 (2002–).

SYNFACTS 誌編集委員 (2005–).

B-9) 学位授与

ZHANG, Kaili, “Development of Tetrahydroxydiboron-Mediated Reductive Molecular Transformations in Water by Use of an Amphiphilic Resin-Supported Palladium Nanocatalyst,” 2024 年 9 月, 博士 (理学).

服部修佑, 「Multielectron Reduction of Esters and Amides Using a Diazabenzacenaphthenium Photoredox Catalyst」, 2025 年 3 月, 博士 (理学).

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), 希少元素の元素循環・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 (2014 年–2020 年) 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、同研究所・環境資源科学研究センターにて展開した(2007年－2019年)。現在、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つつある。なかでも最近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。また分子研内外の研究者とチームで取り組み遷移金属触媒カップリング反応の極端紫外光分光を利用したオペランド観察による反応機構解析、企業との産学連携による基幹的有機化合物の工業生産プロセスへの展開研究などの共同研究に取り組みつつある。さらに、基礎研究として、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。また特にグループ内での奥村博士(2024年3月転出：現京都大学)との協働により新規な光触媒の開発を推進し、従来にないカルビノール基の極性転換反応を開発・展開し、更にはエステル基の光触媒還元を世界に先駆けて実現した。本課題は現在も京都大学との共同研究として継続され大きな成果を上げつつある。

楳山 儀恵（准教授）（2014 年 6 月 1 日着任）

大塚 尚哉（助教）
加藤 雅之（大学院生）
寺島 悠人（大学院生）
西岡 雪奈（技術支援員）
中井 愛里（技術支援員）
原田 晋子（技術支援員（派遣））
丸山 莉央（技術支援員（派遣））
牛田 妃菜乃（事務支援員（派遣））

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

- ペルフルオロハロゲン化ベンゼンを基盤とする触媒機能の体系化
- ハロゲン結合を活用する高分子触媒反応場の開発
- 三中心四電子ハロゲン結合を活用するハレニウム錯体触媒の創成と触媒機能の開拓
- 全フッ素ハロゲン化リレン化合物の精密合成と多機能性材料への応用
- 化学反応空間の構築と有機合成反応開発への応用
- 自動有機合成システムの構築と有機合成への応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- 種々のペルフルオロヨードベンゼンが、ピリジンとアリルシラトランとのアリル化反応、クロチル化反応、プレニル化反応の触媒として機能することを見出した。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。触媒母骨格の立体的影響ならびに電子的影響を詳細に調査し、鈴木敏泰チームリーダーとの共同研究により、反応の駆動力と推測される分子間の静電相互作用を計算化学的に示すことに成功した。現在、ペルフルオロハロゲン化ベンゼンを基盤とする触媒機能の体系化を試みている。次年度の掲載決定に向け、機械学習によるデータ解析結果を加え、論文の改訂と実験項の作成を進めている。
- ハロゲン結合供与部位を有する高分子と DMAP から調製した高分子触媒が、水中でのアシル基転移反応に有効であることを見出した。産総研触媒化学融合研究センター田中主任研究員と共同研究を実施し、固体 DNP-NMR 測定により高分子触媒中の DMAP とそのハロゲン結合供与能を検証した。分光学的に触媒活性中心となる DMAP を同定することに初めて成功した。共同研究の成果について、現在、論文を執筆中である。さらに、ハロゲン結合供与部位を有する高分子を溶媒の代替として用いることで、本触媒反応システムを ppm レベルの触媒反応へと展開することに成功した。岐阜医療科学大学の萬代准教授と共同研究において ppm レベルでの不斉触媒化に挑戦し、開発した不斉高分子触媒がエナンチオ選択性の発現に有効であることを明らかにした。
- エチ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構造解析に成功した。合成した錯体が、向山型反応や細見-櫻井反応において、極めて高い触媒活性を示すことを見出した。NMR や CSI-MS 測定により本錯体触媒の反応駆動力を実験化学的に検証した。これらの成果をもとに、新たなハレニウム錯体触媒を設計・開発した。様々な求電子剤に対して、多くのケイ素系求核剤を反応させることができることを見出した。

- d) 全フッ素ハロゲン化ベンゼンでは達成できない新規機能の探究を目的として、全フッ素ハロゲン化多環芳香族の精密合成を実施した。構成素子となる部分フッ素化ナフタレンの位置選択的フッ素化法を確立した。メタ位をヨウ素、臭素、塩素で置換した全フッ素ハロゲン化ペリレンの合成に成功した。全フッ素ハロゲン化ペリレンおよびその誘導体が、市販の全フッ素ハロゲン化ベンゼンとは異なる分子配列を形成し、ハロゲン元素の違いに伴う発光特性を有することを見出した。論文投稿に向けて、現在、物性データの収集中である。
- e) 化学反応の開発は、新規有機分子の精密合成を実現するうえで重要な鍵となる。合成研究から機能創成研究への迅速展開を目的として、これまで取り組んできた新規有機分子の合成と機能開拓に、情報科学手法を活用する反応開発システムの構築を進めている。静岡大武田准教授、山手機器センター鈴木敏泰チームリーダーと共同研究を実施し、機械学習と量子化学計算の融合による反応開発を行った。その結果、定量的な解析にもとづく反応条件の最適化が可能になり、反応収率の飛躍的な向上に成功した。本共同研究の成果について、学術誌に論文投稿中である。また、有機低分子の反応性の理解と定量化を実現する機械学習モデルの開発に成功した。アプリケーションとしての実装に向けて、マテリアルインフォマティクス企業と共同研究を実施し、アプリ開発を行った。さらに、市販試薬約40,000個の反応性パラメータを推算し、得られた推算値をもとに低分子医薬品の類縁体の合成に成功した。
- f) バッチ型有機合成の自動化は、実験操作の多様性から、材料化学や生命化学分野に比べて大きく遅れをとっている。ハイスループット合成装置の導入が代表的な自動化手法として知られているが、導入コストと取得データ量の多さから、十分に活用されていない。榎山グループでは、自動有機合成システムとしてCole-Parmer社のIntegrity-10を導入した。本システムは、10本のリアクターを独立制御でき、並列合成が可能である。各リアクターの温度、攪拌速度、反応時間を精密に設定できるため、反応条件の最適化が効率的に行える。さらに、システムはコンパクトな設計であり、ラボ内での柔軟な運用が可能である。現在、分離と評価の自動化システムを構築しながら、データ駆動型研究と本装置の融合研究を推進している。

B-1) 学術論文

K. TAKEDA, N. OHTSUKA, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Prediction Method for Reaction Yield of Deuteration of Polyfluoroperylene Using Generative AI Techniques,” *Comput.-Aided Chem. Eng.* **53**, 2689–2694 (2024). DOI: 10.1016/b978-0-443-28824-1.50449-x

N. OHTSUKA, H. OTA, S. SUGIURA, S. KAKINUMA, H. SUGIYAMA, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Perfluorohalogenated Naphthalenes: Synthesis, Crystal Structure, and Intermolecular Interaction,” *CrystEngComm* **26**, 764–772 (2024). DOI: 10.1039/d3ce01124k

B-4) 招待講演

榎山儀恵, 「有機合成化学者のためのケミカルスペースを考える：化学反応性の定量化と有機合成への応用」, IRCCSフォーラム産学共創ワークショップ, 名古屋市, 2025年3月.

榎山儀恵, 「暗黙知から形式知へ 有機合成のデジタル化を考える」, フロー・マイクロ合成研究会in加賀, 加賀市, 2025年1月.

榎山儀恵, 「全フッ素ハロゲン化多環芳香族の科学——デジタル有機合成からAI有機合成への挑戦——」, 第97回白鷺セミナー, 堺市, 2024年12月.

榎山儀恵, 「ハロゲンによる元素置換戦略：新たな機能性有機分子の創成をめざして」, 第55回中部化学関係学協会支部連合秋季大会, 名古屋市, 2024年11月.

楳山儀恵,「有機合成のデジタル化に基づく分子性ハロゲンの精密合成科学」,第1回東海ハロゲン科学研究会,静岡市,2024年9月.

楳山儀恵,「デジタル有機合成から有機合成DXへ」,日本化学会関東支部2024年度講演会「有機合成とDX——基礎／探索から製造プロセスまで——」,オンライン開催,2024年9月.

楳山儀恵,「ハレニウム錯体触媒の創成:化学反応の地図づくりから低分子医薬品類縁体合成への展開」,第182回創薬科学セミナー／GTRセミナー,名古屋市,2024年6月.

楳山儀恵,「全フッ素ハロゲン化多環芳香族化合物の科学:合成・構造・相互作用」,第20回フッ素相模セミナー,綾瀬市,2024年6月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本プロセス化学会東海地区フォーラム幹事(2021-).

B-8) 大学等での講義,客員

九州大学,集中講義講師,2025年1月.

B-10) 競争的資金

科研費学術変革領域研究(A)(計画研究),「精密合成を迅速に実現する全データ駆動型反応開発システムの構築」(代表:楳山儀恵),大塚尚哉(研究分担者)(2021年度-2025年度).

科研費学術変革領域研究(A),「デジタル化による高度精密有機合成の新展開」総括班(代表:大嶋孝志),楳山儀恵(研究分担者)(2021年度-2025年度).

科研費基盤研究(C),「フッ素化ペリレン化合物の合成とデバイスへの応用」(代表:鈴木敏泰),楳山儀恵(研究分担者)(2023年度-2025年度).

科学技術振興機構ムーンショット型研究開発事業(受託研究),「人と融和して知の創造・越境をするAIロボット」(代表者:牛久祥孝),「汎用型有機合成ロボットの活用による反応条件予測AI」,楳山儀恵(研究分担者)(2024年度-2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

当グループでは,精密合成化学を基盤として,有機機能性分子の設計・合成・機能化を進めている。これまでに,種々の新規ハロゲン分子の精密合成に取り組み,これらの分子が,触媒分子として機能することを見出してきた。特に,所内外の研究グループと共同研究を実施することで,ハロゲン原子を起点とする様々な分子間相互作用を詳細に考察し,これらの分子間相互作用が開発した触媒の機能発現に重要な役割を果たしていることを実証している。2024年度は,これまで取り組んできた研究成果を学術論文としてまとめ,現在,2報の論文を*ChemRxiv*で公開中であり,2025年度中の論文掲載を目指す。また,執筆途中の論文が6報あり,2025年度はこれらの論文投稿に注力する。従来法による反応および触媒の開発に加え,インフォマティクスを活用した次世代精密有機合成システムの構築に尽力し,有機ハロゲン分子の精密合成から機能創成への研究展開を加速する。

今後は,有機合成のデジタル化を推進しながら,新たな分子性触媒・分子変換反応を開発する。さらに,機能性有機分子材料の開発へと研究を展開することで,ハロゲン元素の触媒科学から精密合成情報科学の学理構築を目指す。近い将来,本研究の成果が,新機能性物質創成の有力な手段として用いられることを目標に,引き続き研究を遂行する。

錯体物性研究部門

瀬川 泰知（准教授）（2020 年 4 月 1 日着任）

張本 尚（助教）
杉山 晴紀（特別訪問研究員）
廣田 宗士（大学院生）
渡邊 幸佑（大学院生）
吉田 瑠（大学院生）
加納 春華（大学院生）
中野 さち子（技術支援員（派遣））
平田 直（技術支援員（派遣））
谷分 麻由子（事務支援員）

A-1) 専門領域：有機合成化学，構造有機化学

A-2) 研究課題：

- a) 3次元幾何構造をもつ機能性有機構造体の合成と機能
- b) トポロジカル π 共役分子の創製
- c) 電子回折結晶構造解析の有機機能性材料開発への活用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 我々は、フタロシアニンの類縁体であるテトラピラジノポルフィラジン（TPyzPz）が3次元的に縮環構造で組み上がったネットワークポリマーの合成に成功した。TPyzPzを鞍状にひずませる大きさの置換基を量子化学計算より特定し、これを置換基にもつモノマーの重合によってネットワークポリマーを得た。得られたポリマーはTPyzPz分子よりも長波長である近赤外領域に吸収をもつことから、 π 共役が伸長した電子構造をもつことが分かった。二酸化炭素ガスの吸着能があることから、ナノ空孔を有するネットワークポリマーであることが示唆された。この成果は縮環 π 共役ポリマーの化学を3次元周期構造へと拡張させるものであり、「パズルのように空間を敷き詰める」有機合成化学を体現するものである。
- b) 生理学研究所村田研究室との共同研究によって、透過型電子顕微鏡を用いた電子回折構造解析（MicroED）の実施に成功した。合成中間体として得られた不溶性の π 共役分子2種について、カラムクロマトグラフィーや再結晶といった精製操作をせず直接MicroEDを行ったところ、分子構造および結晶中における配列様式を決定することに成功した。本研究は不溶性 π 共役分子の構造決定という点で画期的であり、様々な不溶性・難溶性分子の合成化学の発展に資する成果である。
- c) テキサス大学オースティン校の鳥居教授、関西学院大学の村上准教授らによる「気孔発生司令因子の機能を妨害する化合物の発見」に関する研究に協力した。当グループがもつ単結晶X線構造解析技術および分子科学研究所のX線結晶構造解析装置を用いることで、鍵となる化合物の構造決定に成功し研究の進展に寄与した。

B-1) 学術論文

K. WATANABE, J. USUBA, Y. HIJIKATA, T. TOYA, Y. TOYOTA, Y. KOBAYASHI, R. MATSUDA, K. NISHIMURA, H. SUGIYAMA and Y. SEGAWA*, “Synthesis of Fully Fused Tetrapyrazinoporphyrazine Polymers Bearing Three-Dimensional Structures Controlled by Steric Repulsion,” *Chem. Commun.* **61**, 2822–2825 (2025). DOI: 10.1039/d4cc06293k

A. NAKAGAWA, K. M. SEPURU, S. J. YIP, H. SEO, C. M. COFFIN, K. HASHIMOTO, Z. LI, Y. SEGAWA, R. IWASAKI, H. KATO, D. KURIHARA, Y. AIHARA, S. KIM, T. KINOSHITA, K. ITAMI, S.-K. HAN, K. MURAKAMI* and K. U. TORII*, “Chemical Inhibition of Stomatal Differentiation by Perturbation of the Master-Regulatory bHLH Heterodimer via an ACT-Like Domain,” *Nat. Commun.* **15**, 8996 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-53214-4

H. SUGIYAMA*, K. WATANABE, C. SONG, K. MURATA and Y. SEGAWA*, “Structure Determination of Tweezer-Shaped π -Extended Tetraphenylenes by Microcrystal Electron Diffraction,” *Chem. Lett.* **53**, upae192 (2024). DOI: 10.1093/chemle/upae192

B-3) 総説, 著書

T. HARIMOTO and Y. ISHIGAKI, “Recent Advances in NIR-Switchable Multi-Redox Systems Based on Organic Molecules,” *Chem. –Eur. J.* **31**(3), e202403273 (2025). DOI: 10.1002/chem.202403273

B-4) 招待講演

瀬川泰知, 「ひずみを乗り越える3次元 π 共役構造の合成戦略」, 光機能物理化学セミナー, 滋賀県草津市, 2024年5月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第34回基礎有機化学討論会実行委員会 (2024). (張本 尚)

理科教育活動

出前授業「自然科学研究機構による授業」愛知県立岡崎北高等学校 (2024).

三重県立伊勢高等学校見学対応 (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

名城大学理工学部, 非常勤講師, 2024年9月–2025年3月.

B-9) 学位授与

廣田宗士, 「含8員環 π 共役分子の設計・合成・性質解明および三次元有機構造体への展開」, 2025年3月, 博士(理学).

渡邊幸佑, 「Theoretical, synthetic, and crystallographic studies on three-dimensional polycyclic π -systems」, 2025年3月, 博士(理学).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「トポロジカル π 共役構造体の創製」瀬川泰知(2022年度–2024年度).

科学技術振興機構創発的研究支援事業(受託研究),「革新的有機半導体を指向した周期的3次元 π 共役構造体の創製」, 瀬川泰知(2022年度–2024年度).

村田学術振興・教育財団研究助成,「細くしなやかで強い半導体性有機材料の開発」, 瀬川泰知(2024年度–2025年度).
立松財団研究助成,「計算法学スクリーニングを併用した3次元電荷輸送材料の効率的探索と開発」, 瀬川泰知(2024年度–2025年度).

科研費研究活動スタート支援,「電荷移動相互作用を鍵とする π 共役分子の三次元集積の実現」, 張本 尚(2024年度–2025年度).

(公財)戸部眞紀財団研究助成,「酸化還元活性な有機分子ユニットをもちいた三次元集積体の精密構築」, 張本 尚(2024年度–2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

今年度は、当グループとして初となる3次元ネットワーク高分子の論文発表を行うことができた。

今後はさらに複雑なトポロジーをもつ有機分子や3次元ネットワーク高分子の合成および機能開拓を行い、既存の有機合成の限界を突破した物質創製研究を遂行していく。3次元的に複雑で、かつ非常に高い対称性をもった構造に着目し、有機合成化学によって幾何学的に要請される構造をもつユニットを精密に設計・合成し、さらにこれを高効率反応によって重合させることで、これまでにない物質創製を行っていく。また、当グループがもつ構造解析の技術・知見を活かして、今後も大学共同利用機関としての役割を果たしていく。

4-8 特別研究部門

藤田 誠（卓越教授（クロスアポイントメント*））（2018 年 4 月 1 日着任）

三橋 隆章（特任助教）

増田 道子（事務支援員）

* 東京大学国際高等研究所（2023 年 4 月 1 日～）

A-1) 専門領域：錯体化学，有機化学，超分子化学

A-2) 研究課題：

a) 結晶スポンジ法の二次代謝酵素の機能解析への応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 結晶スポンジ法は，結晶スポンジと呼ばれる多孔性の結晶に解析対象物を染み込ませることで，解析対象物を結晶内で整列させ，X線回折法により構造解析を達成する手法である。結晶スポンジ法を用いることで，小分子の構造決定を迅速に達成することができる。この結晶スポンジ法の有力な応用先として，二次代謝酵素の機能解析研究を挙げることができる。なぜならば，二次代謝酵素の機能解析を行う際，二次代謝酵素から生産される酵素産物を構造決定する過程が研究のボトルネックになることがしばしばあるためである。こうした背景から，我々は，結晶スポンジ法を活用した二次代謝酵素の機能解析研究を展開しており，特に本年度は，昨年度から着目している巨大ウイルス由来の二次代謝酵素について，補因子の種類により酵素産物に変化する現象を見いだすなどより詳細な解析を達成するとともに，結晶スポンジ法を用いた二次代謝物のコンフォメーション解析や，結晶スポンジを活用した二次代謝研究の新しいワークフローの提案などをおこなった。

B-1) 学術論文

R. EBIHARA, T. NAKAMA, K. MORISHIMA, M. YAGI-UTSUMI, M. SUGIYAMA, D. FUJITA, S. SATO and M. FUJITA, “Physical Isolation of Single Protein Molecules within Well-Defined Coordination Cages to Enhance Their Stability,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(7), e202419476 (2025). DOI: 10.1002/anie.202419476

K. IIZUKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “Host-in-Host Complexation: Activating Classical Hosts through Complete Encapsulation within an M_9L_6 Coordination Cage,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(6), e202422143 (2025). DOI: 10.1002/anie.202422143

E. TSUNEKAWA, M. FUJITA and T. SAWADA, “A Discrete Four-Stranded β -Sheet through Catenation of M_2L_2 Metal–Peptide Rings,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(4), e202416442 (2025). DOI: 10.1002/anie.202416442

Y. DOMOTO, R. NAKABAYASHI, T. TSURUMI, K. YAMAMOTO, H. HAYASHI, Y. NAKAMURA and M. FUJITA, “Fine-Tuning of the Sequential Self-Assembly of Entangled Polyhedra by Exploiting the Side-Chain Effect,” *Chem. –Asian J.* **20**(6), e202401378 (2025). DOI: 10.1002/asia.202401378

K. IIZUKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “Template and Solid-State-Assisted Assembly of an M_9L_6 Expanded Coordination Cage for Medium-Sized Molecule Encapsulation,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(47), 32311–32316 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c14509

C. PARK, T. MITSUHASHI, N. WADA, T. KIKUCHI and M. FUJITA, “New Workflow for the Structure Elucidation of Trace Amount Natural Products with Microgram-Scale Crystalline Sponge Method: A Scaled-Down Genome-Mining Study,” *Chem. Lett.* **53(11)**, upae202 (2024). DOI: 10.1093/chemle/upae202

Y. JUNG, T. MITSUHASHI, K. KAGEYAMA, T. KIKUCHI, S. SATO and M. FUJITA, “Conformational Analysis of (+)-Germacrene D-4-ol Using the Crystalline Sponge Method to Elucidate the Origin of its Instability,” *Chem. –Eur. J.* **30(39)**, e202400512 (2024). DOI: 10.1002/chem.202400512

Y. JUNG, T. MITSUHASHI, T. KIKUCHI and M. FUJITA, “Functional Plasticity of a Viral Terpene Synthase, OILTS, that Shows Non-Specific Metal Cofactor Binding and Metal-Dependent Biosynthesis,” *Chem. –Eur. J.* **30(31)**, e202304317 (2024). DOI: 10.1002/chem.202304317

H. TAMURA, T. NAKAMA, A. ROSSEN, H. ISHIKITA and M. FUJITA, “Organic Solvent-Induced Structural Changes in a Protein Confined in a Giant Coordination Cage,” *Chem. Lett.* **53(5)**, upae101 (2024). DOI: 10.1093/chemle/upae101

B-4) 招待講演

M. FUJITA, “Self-Assembly of Gigantic Coordination Polyhedra: From Synthetic to Peptidic,” The International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (ISMSC 2024), Hangzhou (China), May 2024.

M. FUJITA, “Molecular Confinement Effects in Self-assembled Cages,” 8th EuCheMS Conference on Nitrogen Ligands, Cassis (France), June 2024.

M. FUJITA, “Molecular confinement effects in self-assembled cages,” Curious 2024, Mainz (Germany), July 2024.

M. FUJITA, “Coordination Self-assembly: From Origins to the Latest Advances,” European Winter School on Physical Organic Chemistry, Bressanone (Italy), February 2025.

B-6) 受賞, 表彰

藤田 誠, Van't Hoff Award (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学会誌編集委員

Chemical Science 誌, Editorial Board (2018–).

Acc. Chem. Soc. 誌, Editorial Board (2018–).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(S), 「フェムトからピコグラム量の極微量代謝物構造解析法の開発」, 藤田 誠 (2024年度–2029年度).

C) 研究活動の課題と展望

昨年度から続けている巨大ウイルス由来二次代謝酵素の結晶スポンジ法を用いた解析は、本年度も一定の成果があった一方、まだ解析すべき酵素が多数存在しており、引き続き研究を続けていくことで今後も様々な発見があると期待している。また今後は、結晶スポンジ法自体を、より微量の化合物をより簡便に構造解析することができる技術へと、更に発展させる研究にも力を入れていきたい。結晶スポンジ法をより強力な手法へと発展させることで、その応用の幅も大きく広がるものと期待している。

木村 真一（教授(クロスアポイントメント*)）(2020年4月1日～2025年3月31日)

栗田 佳子（事務支援員）

*大阪大学大学院生命機能研究科

A-1) 専門領域：物性物理学，量子ビーム科学

A-2) 研究課題：

- a) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究
- b) 物質科学に向けた新しい放射光分光法の開発
- c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究：磁性と伝導が複雑に絡み合うことにより新しい機能性が現れる固体・薄膜について，低温・高圧・高磁場下の赤外・テラヘルツ分光と高分解能三次元角度分解光電子分光および時間分解分光により，機能性の起源である電子状態を詳細に決定している。また，それらの実験条件に合わせた第一原理電子状態計算を組み合わせることで，機能性固体・薄膜の電子状態の総合的な情報を得ている。
- b) 物質科学に向けた新しい放射光分光法の開発：UVSOR や次世代放射光で用いることを想定した新たな分光法を開発する。特に，電子構造のダイナミクスを可視化することを目標に，新たな光電子分光法と赤外分光法の開発を進めており，物質科学への応用を図る。
- c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発：スピン偏極高輝度電子源を用いた高エネルギー分解能スピン・角度分解共鳴電子エネルギー損失分光法の開発を進めている。

B-1) 学術論文

Y. CHEN, T. NAKAMURA, H. WATANABE, T. SUZUKI, Q. REN, K. LIU, Y. ZHONG, T. KANAI, J. ITATANI, K. OKAZAKI, H. S. SUZUKI, S. SHIN, K. IMURA, N. K. SATO and S. KIMURA, “Photo-Induced Nonlinear Band Shift and Valence Transition in SmS,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **94**(1), 013702 (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.013702

K. WANG, S. KIMURA, K. YAMAUCHI, H. YAMAHARA, H. MURAKAMI, M. SEKI, T. OGUCHI, H. TABATA and M. TONOUCHI, “Temperature Dependence of Low-Frequency Phonon Behavior in Gadolinium Gallium Garnet and Yttrium Aluminum Garnet,” *J. Appl. Phys.* **136**(24), 245105 (2024). DOI: 10.1063/5.0242789

H. WATANABE, Y. TAKENO, Y. NEGORO, R. IKEDA, Y. SHIBATA, Y. CHEN, T. NAKAMURA, K. YAMAGAMI, Y. HIRATA, Y. ZHANG, R. TAKAHASHI, H. WADATI, K. TAMASAKU, K. IMURA, H. S. SUZUKI, N. K. SATO and S. KIMURA, “Photoinduced Phase Transition on Black Samarium Monosulfide,” *Phys. Rev. B* **110**(24), 245133 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevB.110.245133

J. H. PARK, M. T. PARK, G. W. BAEK, S. KIMURA, M. H. JUNG and K. J. KIM, “Unraveling the Origin of Conductivity Change in Co-Doped FeRh Phase Transition,” *Commun. Mater.* **5**(1), 250 (2024). DOI: 10.1038/s43246-024-00694-y

R. IKEDA, H. WATANABE, M. J. HEON, M. H. JUNG, K. TAKASAN and S. KIMURA, “Light-Field-Driven Non-Ohmic Current Generation by an Intense THz Pulse in a Weyl Semimetal,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **93(5)**, 053701 (2024). DOI: 10.7566/JPSJ.93.053701

B-3) 総説, 著書

中村拓人, 木村真一, 「単原子層重い電子系の実現—単原子層物質における近藤効果—」, *固体物理*, **59(6)**, 331–339 (2024).

B-4) 招待講演

S. KIMURA, “Anisotropic Non-Fermi Liquid and Dynamical Planckian Scaling of Quasi-Kagome Kondo Lattice Systems,” American Physical Society Joint March & April Meeting: Global Physics Summit 2025, Anaheim (USA), March 2025.

S. KIMURA, “Light-Field-Driven Non-Ohmic Current and Keldysh Crossover in a Weyl Semimetal,” 2024 MRS Spring Meeting & Exhibit, Seattle (USA), April 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会評議員 (2024–2026).

学会の組織委員等

国際ワークショップ「12th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources」国際諮問委員 (2024).

国際会議「International Conference on Low Energy Electrodynamics of Solids」, Organizing Committee Program Committee Member (2024–2025).

その他

アグネ技術センター「固体物理」誌友 (2023–2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

大阪大学大学院生命機能研究科, 教授, 2013年7月–.

大阪大学理学部, 講義「光物理学」, 2024年4月–9月.

大阪大学大学院理学研究科, 講義「シンクロトロン分光学」, 2024年4月–9月.

大阪大学全学教育推進機構, 講義「力学詳論II」, 2024年10月–2025年3月.

大阪大学理学部, 講義「現代物理学の最前線」, 2024年10月–2025年3月.

大阪大学大学院生命機能研究科, 講義「基礎物理学I」, 2024年4月–6月.

大阪大学大学院生命機能研究科, 実習「基礎物理学実習I」, 2024年6月–8月.

大阪大学生命機能研究科, 講義「生体ダイナミクス概論III」, 2024年4月–9月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「時間・スピン分解共鳴電子散乱法の確立と光励起電子・格子・スピン相関の直接観測」, 木村真一 (2023年度-2025年度).

科研費挑戦的研究(開拓),「ナノスピン角度分解共鳴非弾性電子散乱法を用いた運動量依存スピン流のオペランド観測」, 木村真一 (2024年度-2027年度).

科研費基盤研究(A),「局所場における光テラヘルツ波変換モデルリングと半導体分析応用」(代表者: 斗内政吉), 木村真一(研究分担者) (2023年度-2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

物質機能の起源である電子構造を明確にすることは、物性の理解を深め、新しい機能性を創りだすのに重要である。そのため、準粒子を観測するための手段として、これまで放射光を使った角度分解光電子分光と赤外・テラヘルツ分光を推進してきた。現在は、準粒子とともに重要な素励起である集団励起の観測を行うために、内殻共鳴電子エネルギー損失分光法(rEELS)の開発を進めている。クロスアポイントメントの5年間で、rEELSをスピン分解、角度分解、時間分解に拡張するとともに、スピン・角度分解共鳴逆光電子分光法の開発も行っていく。

大西 洋（教授（クロスアポイントメント*））（2021 年 11 月 1 日着任）

栗田 佳子（事務支援員）

*神戸大学大学院理学研究科

A-1) 専門領域：界面分子科学，触媒科学

A-2) 研究課題：

a) 有限厚さをもつ固液界面のオペランド計測：創／省エネルギーを支えるサイエンスの構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 創エネルギーと省エネルギーという社会ニーズに応えるために，高収率の半導体光触媒と低摩擦の潤滑油が最近 20 年のあいだに次々と開発されてきた。これら新材料をオペランド計測する手法に工夫をこらして有限の厚さ（1 μm –1 nm）をもつ液体–固体界面が機能を発現するしくみを理解する。分子論的な界面（液体分子と固体分子が接触する場所）でおきる現象と，分子論的な界面へ物質とエネルギーを入出力する場所でおきる現象を同時に計測し一体として理解することの重要性を光触媒（物質変換）と潤滑油（力学的エネルギー散逸）というケーススタディをとおして世界へ発信することを目的とする。①電子励起状態にある光触媒の軟エックス線分光と全反射光学分光による計測評価②氷と不凍液体が接する界面のナノ力学計測が本年度の成果である。

B-1) 学術論文

Y. H. CHEW, N. SAIJO, Y. KUMABE, T. TACHIKAWA and H. ONISHI, “Unravelling the Influence of Major Seawater Salt Ions on the Photogenerated Charge Carriers in a Sr-Doped NaTaO₃ Photocatalyst via ATR-FTIR,” *J. Phys. Chem. C* **129**(7), 3531–3538 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c07833

C.-M. FUNG, B.-J. NG, Y.-H. CHEW, C.-C. ER, J. LOW, X. GUO, X. Y. KONG, L.-L. TAN, H. ONISHI, A. R. MOHAMED and S.-P. CHAI, “MXene Quantum Dot-Sensitized Heterostructures for Broad Solar Spectrum CO₂ Reduction,” *Cell Rep. Phys. Sci.* **5**, 102296 (2024). DOI: 10.1016/j.xcrp.2024.102296

R. YANAGISAWA, T. UEDA, K. NAKAMOTO, Z. LU, H. ONISHI and T. MINATO, “The Interface between Ice and Alcohols Analyzed by Atomic Force Microscopy,” *J. Chem. Phys.* **161**(2), 024702 (2024). DOI: 10.1063/5.0211501

T. OTAKE, R. KAJITA, I. OGASAWARA, M. IWAKI, H. ONISHI and K. AMANO, “Theoretical Investigation of Interaction Measurements in Liquid Systems with Viscosity Distributions,” *Phys. A* **647**, 129918 (2024). DOI: 10.1016/j.physa.2024.129918

Y. H. CHEW and H. ONISHI, “Infrared Absorption of Zn_{0.5}Cd_{0.5}S Photocatalyst Bandgap-Excited Under an Aqueous Environment,” *J. Phys. Chem. C* **128**(11), 4535–4543 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c08343

B-4) 招待講演

大西 洋, 湊 丈俊, 「市販AFM 装置を用いた水-液体界面の計測」, 次世代ナノプローブ技術委員会第5回研究会, 東京, 2025年1月.

森口志穂, 大西 洋, 平山朋子, 山下直輝, 「潤滑油における添加剤吸着膜の分子スケール構造と摩擦特性」, 第20回高分子表面研究討論会, 神戸, 2024年11月.

大西 洋, 「水中で進む触媒反応のオペランド計測: 赤外分光とマイクロ電気化学」, 触媒学会西日本支部第15回触媒科学研究発表会, 神戸, 2024年11月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

(社)応用物理学会薄膜・表面物理分科会幹事 (2006-).

日本表面真空学会理事 (2022-2024).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構創発的研究支援事業アドバイザー (創発AD) (2023-).

北海道大学触媒科学研究所運営協議会委員 (2024-).

学会誌編集委員

日本表面真空科学会電子ジャーナル委員 (2002-).

その他

水-不凍液界面のナノ力学計測を報告した原著論文 (*J. Chem. Phys.* 誌) とプレスリリース (分子研および神戸大学) が広く注目され, *Physics Today* (アメリカ物理協会広報誌), JST サイエンスポータル, Yahoo ニュースなど, 国内外 30 以上のウェブ媒体で二次報道された。

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A), 「人工光合成をめざす半導体光触媒: オペランド計測によるミリ秒反応化学の解明」, 大西 洋 (2022年度-2024年度).

科研費基盤研究(S), 「境界潤滑の科学-添加剤吸着層の構造・物性に基づく低摩擦現象の本質的理解」 (代表者: 平山朋子), 大西 洋 (研究分担者) (2023年度-2027年度).

C) 研究活動の課題と展望

【光触媒】水-光触媒界面ですすむ物質変換に焦点を絞った研究を展開していく。従来の光触媒ダイナミクス研究はフェムト秒からマイクロ秒で進む電子のうごき (電子励起と電荷分離) に注目してきた。有限の厚さをもつ水-光触媒界面で物質輸送を含むミリ秒の反応化学の解明をめざす。

【潤滑油】広い意味での潤滑油-固体界面におけるエネルギー散逸の鍵となる分子運動性を定量評価するために原子間力顕微鏡を用いたナノ力学計測を進めていく。

高谷 光（准教授（兼任*¹））（2022 年 3 月 1 日～2022 年 3 月 31 日）
（教授（兼任*²））（2022 年 4 月 1 日～2025 年 3 月 31 日）

神谷 美穂（事務支援員）

*1 京都大学

*2 帝京科学大学生命環境学部

A-1) 専門領域：有機合成化学，有機金属化学，ペプチド科学，バイオマス有効活用，X線吸収分光

A-2) 研究課題：

- a) X線吸収分光を基盤とする革新触媒の創製
- b) マイクロ波照射による有機反応促進機構の解明
- c) メタル化ペプチド基盤人工酵素を用いる木質バイオマスの循環資源化
- d) 未利用バイオマス由来有機分子を基盤とする高機能バイオマテリアル創出

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 溶液X線種分光と量子化学計算の融合によって、NMR等の従来の分析手法では困難な、常磁性の触媒活性種や高活性で不安定な活性種の「その場観 XAFS」の開発を目的とした研究を推進してきた。特に UVSOR (BL3U)において、長坂博士と共同研究を行ない、酸素や水分に対して不安定な反応活性種の溶液軟X線吸収分光法の開発に成功した。具体的には、鉄触媒クロスカップリング反応の触媒活性種であるアリール鉄錯体や Grignard 反応剤の溶液 XAFS 測定を行うために、各種有機溶媒に高い耐性を有するピーク樹脂製フローセルを開発した。このセルでは、金蒸着された SiN 薄膜を窓材として用いており、金線で窓材をアースすることによって有機溶媒の送液によって発生・蓄積する静電気を除去できる。そのため、従来型フローセルで問題となっていた静電気によるノイズやベースラインのドリフトを抑え、長時間安定して溶液 XAFS 測定を行える。また、上記フローセルを用いる XAFS 測定では、常に新鮮なサンプル溶液が供給されるため、軟X線によるサンプルダメージを最小限に抑えることができる。さらに、フローリアクタを接続することで、実際の反応に用いる試薬と触媒を流路内で反応させ、系中に生成する反応／触媒活性種の「その場観察」が可能であるという特徴を有する。2021 年度に不安定な Fe/Ni 触媒種の Fe-L/Ni-L 端および有機マグネシウム反応剤（Grignard 試薬）の C-K/O-K 端の溶液 XAFS 測定に成功した。これらの成果を基盤として、2023-2024 年度では様々な有機金属種の構造・反応機構解析に成功した。
- b) マイクロ波照射化学合成は、電熱ヒータ等の従来型の通常熱源を用いる反応と比べて、1/10 程度のエネルギー消費量で、最大 1000 倍にも達する反応加速効果が得られること、反応物質や触媒選択加熱による反応制御によって所望の物質のみを高選択的に合成できる優れた特徴を有する。しかしながら、このような加速現象の発見から 30 年以上が経過した現在でも、マイクロ波照射によって化学反応が加速される分子科学的な機序は明らかになっていない。我々は、マイクロ波による反応加速現象の学理解明を目的として、2020 年度より分子研（田中、長坂）と核融合研（加藤、村上）の融合研究を立上げ、マイクロ波照射下における化学反応のその場観察と分子動力学・QM/MM による分子挙動のシミュレーションについて基礎検討を行っている。2021 年度は、UVSOR の赤外／THz ビームライン（BL1B）の光学系に挿入できるマイクロ波反応装置の開発に成功し、マイクロ波照射下でのテラヘルツ測定に成功した。こ

これらの成果を背景に、2022–2024年度ではマイクロ波と様々な有機金属種の創発現象に基づく反応開発に成功した他、環境省の革新的な省CO₂実現のための部材や素材の社会実装・普及展開加速化事業「CO₂削減に貢献する大電力高効率Ga₂Nマイクロ波加熱装置」に採択された。本課題では、上述の装置を用いて「マイクロ波反応『その場』観察装置の開発」に取り組む。

- c) 木質バイオマスはリグニン、セルロース、ヘミセルロースを主成分とする複雑な生体分子である。我々は、リグニンおよびセルロースを認識するペプチドと金属触媒を結合した人工酵素を開発し、これを用いて木質夾雑系からのリグニン／セルロース選択的な分子変換法の開発に取り組んでいる。2020年度には、リグニン認識能を有する12残基ペプチドに高い酸化能を有するRu錯体触媒を結合した人工酵素の合成に成功した。また、蛍光異方性測定と分子動力学計算によってペプチドのリグニン認識においてペプチド残基とリグニン水酸基および芳香族骨格の水素結合とCH/ π 型相互作用が支配的であることを明らかにした。2022–2024年度では、分子動力学計算およびITCによるリグニン認識機構の解明に取り組むとともに、マイクロ波／メカノケミカル反応による木質バイオマスの高効率／高選択的な分解反応の開拓に取り組んだ結果、廃棄木材および廃棄生花（ロスフラワー）からの高付加価値な医薬品原料（2025年5月上梓予定）の抽出・製造および製品化に成功した他、廃棄自動車由来PE/PPの高効率分解と循環資源化に成功し、特許出願を行った。

B-1) 学術論文

S. NAKAJIMA, T. HASHIMOTO, S. LU, D. HASHIZUME, H. MATSUDA, T. HATAKEYAMA, K. ISOZAKI, H. TAKAYA* and M. NAKAMURA*, “SciPROP-R: An Effective Bisphosphine Ligand for the Chemo-Selective Iron-Catalyzed Suzuki–Miyaura Coupling of Alkyl Chlorides,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **96**, 1298–1309 (2023). (BCSJ Award)

F. PINCELLA, K. ISOZAKI,* R. SATO, T. TERANISHI, H. TAKAYA* and M. NAKAMURA*, “Reusable Magnetite Nanoparticle (Fe₃O₄ NP) Catalyst for Selective Oxidation of Alcohols under Microwave Irradiation,” *ACS Omega* **9**, 24477–24488 (2024).

E. KANAO, H. OSAKI, T. TANIGAWA, H. TAKAYA, T. SANO, J. ADACHI, K. OTSUKA, Y. ISHIHAMA and T. KUBO*, “Rational Supramolecular Strategy via Halogen Bonding for Effective Halogen Recognition in Molecular Imprinting,” *Anal. Chem.* **95**, 9304–9313 (2023).

R. TOYODA, N. FUKUI, H. TANIGUCHI, H. URATANI, J. KOMEDA, Y. CHIBA, H. TAKAYA, H. NISHIHARA and R. SAKAMOTO*, “Discrete Coordination Nanochains Based on Photoluminescent Dyes Reveal Intrachain Exciton Migration Dynamics,” *Nat. Commun.* **16**, 1367 (2025).

S. KIMURA, K. ADACHI, Y. ISHII, T. KOMIYAMA, T. SAITO, N. NAKAYAMA, M. YOKOYA, H. TAKAYA, S. YAGAI, S. KAWAI, T. UCHIHASHI and M. YAMANAKA, “Molecular-Level Insights into the Supramolecular Gelation Mechanism of Urea Derivative,” *Nat. Commun.* **16**, 3758 (2025).

B-4) 招待講演

高谷 光, 「放射光による文化財分析」, 奈良教育大学公開シンポジウム「科学からみえる伝統のかたち」, 奈良教育大学, 奈良, 2024年10月.

高谷 光, 「文化財と放射光科学」, 第3回茨城大学KEK DAY「量子線科学講座_量子の目でモノを見る」, 茨城大学, 水戸, 2024年1月.

高谷 光,「放射光計測の高度化学利用：軟X線で拓く物質・材料科学」, 分子研 UVSOR 極端紫外光研究施設 40 周年記念行事記念講演会, 分子科学研究所, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2023 年 12 月.

H. TAKAYA, “Multimetal-Catalyzed One-Stop Chain Transfer Oligomerization of Ethylene/Propylene for Synthetic Lubricants,” International Symposium on Catalysis and Fine Chemicals 2023 (C&FC2023), Tokyo (Japan), December 2023.

B-6) 受賞, 表彰

S. NAKAJIMA, T. HASHIMOTO, S. LU, D. HASHIZUME, H. MATSUDA, T. HATAKEYAMA, K. ISOZAKI, H. TAKAYA* and M. NAKAMURA, 日本化学会論文誌 BCSJ 賞 (2023).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

SPring-8 利用推進懇談会「SPring-8 先端放射光技術による化学イノベーション研究会」主査委員 (2017–2024).

学会の組織委員等

日本化学会春季年会イノベーション共創プログラム (CIP) 企画委員 (2015–).

日本化学会第 105 春季年会 ATP 企画 TIC「インフォマティクスの基礎」幹事 (2018–).

日本化学会第 104 春季年会特別企画「化学者のための放射光ことはじめ——XAFS の基礎と応用」代表幹事 (2024–2025).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会産学協力研究委員会「R024 電磁波励起反応場委員会」幹事委員 (2020–2024).

環境省「革新的な省 CO₂ 実現のための部材や素材の社会実装・普及展開加速化事業」有識者委員会委員 (大学) (2024).

学会誌編集委員

日本電磁場エネルギー応用学会機関誌編集委員 (2019–).

その他

足立区「足立区ブランド」認定選考委員 (2023–2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

京都大学量子ビームアライアンス, オンライン講義講師,「X線吸収分光」, 2021 年–.

中部大学工学部, 客員教授, 2023 年 3 月–2024 年 3 月.

筑波大学数理物質系物質工学域, 客員教授, 2023 年 4 月–.

帝京科学大学生命環境学部,「有機化学 I」「有機化学 II」「化学療法論」「生命科学基礎実験 I」「生命科学基礎実験 II」「1 年次基礎ゼミ」, 2022 年–.

理化学研究所, 客員研究員, 2022 年 4 月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (C),「植物バイオマス循環資源化のためのメタル化ペプチド人工酵素の創製」, 高谷 光 (2021 年度–2023 年度).

科学技術振興機構CREST 研究,「社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出」領域,「分子・情報技術の創発による液相分離の限界突破と社会実装」(代表:久保 拓也),高谷 光(主たる共同研究者)(2023年度-2028年度).
科学技術振興機構CREST 研究「新たな生産プロセス構築のための電子やイオン等の能動的制御による革新的反応技術の創出」領域,「レドックスメカノケミストリーによる固体有機合成化学」(代表:伊藤 肇),高谷 光(共同研究者)(2021年度-2025年度).

科学技術振興機構研究開発最適展開支援プログラムA-STEP 産学共同(本格型): with/post コロナにおける社会変革への寄与が期待される研究開発,第4分野(アグリ・バイオ),「糖鎖認識PEG 誘導体を用いた糖たんぱく質の糖鎖に基づく精密分離技術の開発」(代表:小林宏資),高谷 光(研究分担者)(2021年度-2025年度).

B-11) 産学連携

共同研究,抗菌化研(株),「新奇な抗菌性物質の開発と作用機序の解明」,高谷 光(2022年-).

共同研究,カネカ(株),「マイクロ波反応の開発」,高谷 光(2024年-).

共同研究,ENEOS(株),「潤滑油成分の物性・構造解析」,高谷 光(2022年-2024年).

共同研究,本田技研工業(株),高谷 光(2022年-2024年).

C) 研究活動の課題と展望

XAS 研究においては,触媒と反応基質を混合・反応させて任意のタイミングでXAS 測定が行えるフローリアクタの開発と,これを用いる均一系触媒反応機構に関する研究,およびマイクロ波照射下におけるin situ 反応解析に注力した研究を行う。特に,未利用バイオマスである廃棄木材や廃棄生花等や廃棄自動車や家電製品由来のプラスチックを研究対象として,触媒・分解反応開発を行うとともに,in situ XAF 測定を利用した分解・脱重合機序の解明を目指す。

中村 彰彦 (准教授(クロスアポイントメント*)) (2022年8月1日～2024年12月31日)
(教授(クロスアポイントメント*)) (2025年1月1日～3月31日)

川口 律子 (事務支援員)

野村 潤子 (事務支援員)

*静岡大学農学部

A-1) 専門領域：生化学，生物物理学

A-2) 研究課題：

- a) ポリエチレンテレフタレート加水分解酵素の改良
- b) ポリエチレンテレフタレート吸着酵素の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) PET 分解酵素の高効率スクリーニングを行うために，ファージ表面に活性型の PET 分解酵素を提示する方法の開発をおこなった。直接ファージのタンパク質と PET 分解酵素を連結すると，立体障害によりファージに生産が確認できなかったため，ファージに SpyCatcher タンパク質，PET 分解酵素に Spytag を連結し，ペリプラズム領域で結合させる方法を試みた。各種プロモーターを検討したところ，コールドショックプロモーターを用いて，ファージの生産量を少し抑えながら PET 分解酵素を誘導することで高い提示率を占めすファージを生産することができた。
- b) 作成した PET 吸着タンパク質のライブラリを RFP と連結し，小スケールでの可溶性酵素生産性の解析を行い，生産可能な変異体のライブラリを取得した。シーケンスを確認し，5 種の変異体を取得した。キチン及びセルロースに対する吸着はほとんど確認できず，また PET への吸着親和性は天然型吸着タンパク質と比較して 2.7 倍向上していた。セルロース，キチン及び PET 粉末をガラス上に配置し，RFP 融合吸着タンパク質で染色したところ，天然型タンパク質では全てが染色されたのに対し，変異体吸着タンパク質では PET のみが強い蛍光を示したことから，PET 染色タンパク質が開発が確認できた。

B-1) 学術論文

R. KUSHIHARA, A. NAKAMURA, K. TAKEGAMI, Y. SETO, Y. KATO, H. DOHRA, T. OHNISHI, Y. TODOROKI and J. TAKEUCHI, “Structural Requirements of KAI2 Ligands for Activation of Signal Transduction,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **122(8)**, e2414779122 (2025). DOI: 10.1073/pnas.2414779122

S. TSUJINO, Y. YAMADA, M. SENDA, A. NAKAMURA, T. SENDA and T. FUJIWARA, “Structural Characterization of Pyruvic Oxime Dioxygenase, a Key Enzyme in Heterotrophic Nitrification,” *J. Bacteriol.* **207(2)**, e00342-24 (2025). DOI: 10.1128/jb.00342-24

Y. OGURA, Y. HASHINO and A. NAKAMURA, “Direct Screening of PET Hydrolase Activity in Culture Medium Based on Turbidity Reduction,” *ACS Omega* **9(31)**, 34151–34160 (2024). DOI: 10.1021/acsomega.4c05488

B-5) 特許出願

WO2025013877(A1), “Protein, and Method for Decomposing Polyethylene Terephthalate,” T. MATSUZAKI, F. YAMAZAKI, T. SAEKI, A. NAKAMURA, R. IINO and N. KOGA (National Institutes of Natural Sciences), 2024年.

B-6) 受賞, 表彰

中村彰彦, 日本応用糖質科学会奨励賞 (2024).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構創発的研究支援事業, 「プラスチックを採して壊すバイオマイクロドロンの創出」, 中村彰彦 (2022年度–2025年度).

科研費挑戦的研究 (萌芽), 「高活性リグニン分解菌を用いた新規リグニンリファイナリー技術の構築」 (代表者: 平井浩文), 中村 彰彦 (研究分担者) (2023年度–2024年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 静岡大学, キリンホールディングス (株), 大阪大学, 「結晶性PET 分解活性の高い酵素の開発」, 中村彰彦 (2023年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

開発したPET 分解酵素提示ファージベクターに変異導入を行い, PET 分解酵素変異体ライブラリーの作成を行う。得られたライブラリーを用いて顕微鏡下でPET 分解活性の計測を行い高活性変異体の取得を試みる。また作成したPET 吸着タンパク質はPET 分解酵素との融合体を作成し, PET 分解活性に与える影響を確認する。

澤井 仁美（准教授（クロスアポイントメント*））（2024 年 4 月 1 日着任）

村木 めぐみ（技術支援員）

川口 律子（事務支援員）

野村 潤子（事務支援員）

*長崎大学大学院総合生産科学研究科

A-1) 専門領域：生物無機化学，生命金属科学，生化学

A-2) 研究課題：

- a) 生体内「鉄」動態の分子科学
- b) 軟X線顕微鏡による生細胞の元素イメージング
- c) ヘムセンサータンパク質を標的とする新規抗菌剤の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 鉄はすべての生物の生命維持に必須の金属元素である。生体内の鉄は Fe^{2+} または Fe^{3+} で存在するが，種々のタンパク質を介して方向性と選択性をもって受け渡しされることで，細胞毒性を抑えつつ，鉄の動態（吸収・輸送・貯蔵・排泄など）が制御されている。しかし，そのような生体内「鉄」動態の分子機序は精密に解明されていない。本研究課題では，鉄イオンの受け渡し機構に関与する各種タンパク質を対象として，タンパク質間相互作用ならびに立体構造の解析により鉄イオンの授受機構を解明することを目的としている。鉄貯蔵タンパク質 Ferritin の H 鎖に対して鉄輸送タンパク質 PCBP が結合して Fe^{2+} を渡し，アポ型になった PCBP は速やかに Ferritin から解離する新しい機構を明らかにした。
- b) UVSOR の岩山グループで開発中の密着型軟X線顕微鏡を用いて，生きている（含水状態）の細胞における元素分布をイメージングする手法の開発に着手した。数種類の接着系培養細胞を蛍光シンチレーター板上で培養した結果，形状がそろった状態で蛍光板に強く接着したイヌの正常腎臓尿管上皮細胞について実験した。炭素ならびにリンの吸収端では，細胞の輪郭（形質膜）や核などの小器官の存在がわかる解像度で観察することができ，XAFS スペクトルを抽出した。鉄については，細胞内濃度が低いため，XAFS 解析までは至っていない。今後，鉄栄養強化細胞や潜在的に鉄量が多い肝細胞などを用いて，鉄の分布を観察する。
- c) 動物の血液に感染する病原菌の多くは，宿主動物の赤血球を破壊し，鉄栄養源としてヘム（ポルフィリン鉄錯体）を奪取して増殖する。しかし，栄養であるはずのヘムが菌体内で余剰になると毒性を示すため，溶血性の病原菌は余剰なヘムを感知して排除するためにヘムセンサータンパク質を有している。したがって，病原菌のヘムセンサータンパク質の機能を阻害する薬剤は抗菌薬の開発に有用となる。本研究課題では，新生児の敗血症や髄膜炎の起因となるだけでなく，乳牛の乳房炎を引き起こし日本の酪農経済に年間 100 億円以上の損失を与える病原菌 *Streptococcus agalactia* のヘムセンサータンパク質 PefR を対象とした。PefR に対して特異的に結合し，ヘム感知能を阻害する素材として VHH 抗体を作製し，各種相互作用解析により PefR に対する VHH 抗体の親和性や結合特異性を明らかにした。

B-3) 総説, 著書

澤井仁美,「膜貫通型鉄還元酵素 Dcytb の構造機能解析により明らかになった細胞への鉄取り込みメカニズム」, 生体の科学, **75**(2), 112–115 (2024).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

H. SAWAI, “Iron as a nutrient: the molecular and cellular mechanisms of dietary iron absorption in humans,” French-Japanese symposium in BioInorganic Chemistry and FrenchBIC annual meeting, Marseille (France), April 2024.

H. SAWAI, “Structural insights into the sensing of iron nutrients as a basis for the development of new drugs,” Gordon Research Conference—Metals in Medicine, Andover (USA), June 2024.

H. SAWAI, “Sensing of iron nutrients as a new target for antibiotic development,” The 11th Asian Biological Inorganic Chemistry (AsBIC11), Guilin (China), December 2024.*

澤井仁美,「生体内におけるヘムおよび鉄イオンの動態と制御について」, 第31回日本血液代替物学会年次大会, 京都, 2024年12月.*

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本鉄バイオサイエンス学会代議員 (2024–).

学会の組織委員等

UK/Japan meeting and workshop on dynamic crystallography, Program Committee (2023–2024).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

九州シンクロトン光応用研究センター会議委員 (2023–2024).

理科教育活動

夢ナビ講義ビデオ (大学受験生向けオンデマンド講義)(2024).

夢ナビLIVE2024 (大学受験生向けオンライン研究室ツアー)(2024).

高大連携公開講座: 教科書の化学実験を体験しよう (2023–).

高校生・大学受験生のための化学・物質関連分野の実験実習 (2023–2024).

出前授業ならびに実験講座, 大村高等学校 (2024).

出前授業ならびに実験講座, 諫早高等学校 (2024).

出前授業ならびに実験講座, 純心女子高等学校 (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

長崎大学大学院工学研究科,「化学・物質工学総合演習」, 2022年5月–.

長崎大学大学院工学研究科／総合生産科学研究科,「実践英語 ABCD」, 2022年5月–.

長崎大学工学部,「技術英語 III」, 2022年9月–.

長崎大学工学部,「生化学 I」, 2023年4月–.

長崎大学医学部医学科／医学部保健学科／歯学部／情報データ学部? 環境学部,「教養モジュール b13: 生体分子の構造と機能」, 2023年6月–.

長崎大学大学院工学研究科,「生命金属ダイナミクス」,2023年8月－.

長崎大学大学院工学研究科／総合生産科学研究科,「生命金属科学特論」,2023年10月－.

長崎大学大学院総合生産科学研究科,「医工連携B：先端医用材料・創薬」,2024年4月－.

長崎大学大学院総合生産科学研究科,「細胞機能生化学特論」,2024年4月－.

長崎大学大学院総合生産科学研究科,「特別研究I」,2024年4月－.

長崎大学工学部,「蛋白質工学」,2024年6月－.

長崎大学大学院総合生産科学研究科,「機能的錯体化学特論」,2024年6月－.

長崎大学大学院総合生産科学研究科,「細胞機能分子メカニズム特論」,2024年10月－.

理化学研究所,客員研究員,2006年10月－.

Lund Institute of Advanced Neutron and X-ray Science (LINXS), LINXS Core Group Fellow, 2023年9月－.

B-10) 競争的資金

(公財)旭硝子財団 2024年度研究助成,「鉄トランスポーターと鉄輸送シャペロンの相互作用による安全で効率的な細胞内 Fe^{2+} 制御機構の解明」,澤井仁美(2024年–2025年).

(公財)アサヒグループ財団学術研究助成 食・生活部門,「鉄栄養素の吸収効率を高める新たな食品成分の探索とその作用機序の解明」,澤井仁美(2024年).

長崎大学令和6年度研究費獲得支援事業,「鉄リレーシステムにより制御される二価鉄イオンの細胞内動態の可視化」,澤井仁美(2024年).

B-11) 産学連携

共同研究,(株)レフェインジャパン,「タンパク質の分子量分布解析」,澤井仁美(2022年度－).

C) 研究活動の課題と展望

これまでに鉄を中心に生体内金属の吸収・輸送・貯蔵の分子機序について、タンパク質レベルでの研究を展開してきた。しかし、試験管内にとり出した個々のタンパク質間の相互作用だけでは説明がつかない現象があることを、細胞レベルでの研究を取り入れることで実感した。つまり、細胞内では金属イオンの局所的な濃度変化により、タンパク質や核酸に対する金属の結合解離が起こり、それに伴い生体分子が離合集散しながら生体内金属の動態を制御しているように観える。細胞内で起きている「真の金属動態」を追跡するために、密着型軟X線顕微鏡を用いて生きている細胞内の金属イオンの分布を(特に Fe^{2+} と Fe^{3+} を区別して)イメージングする方法を確立したい。生細胞内の各金属イオンの分布が、金属関連タンパク質の局在・形状・活性などと、どのようにリンクするのかを解明することで、分子科学的な理解が進んでいない「金属毒性の閾値(栄養か毒かの境界)」を浮き彫りにしていきたい。

畑中 美穂（准教授（クロスアポイントメント*））（2024 年 6 月 1 日着任）

増田 道子（事務支援員）

千葉 史朱香（事務支援員）

*慶應義塾大学理工学部

A-1) 専門領域：理論化学，マテリアルズインフォマティクス

A-2) 研究課題：

- a) 触媒および高分子材料の反応経路のデータベース化と機械学習への応用
- b) ベイズ最適化を活用した円錐交差点の探索手法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 近年，データ駆動科学を触媒や高分子材料に応用する試みが注目を集めている。しかし，限られたデータセットで予測精度の高い機械学習モデルを構築するには，材料に対する適切な特徴量の開発が不可欠である。我々は，二元共重合体の特徴量として，モノマーペアの重合初期段階における素過程の反応エネルギーや活性化障壁を含む DFT 計算値が有用であることを示した。また，この考え方を触媒にも拡張し，遷移金属錯体触媒の素反応のエネルギーを特徴量に用いるべく，DFT 法による計算結果の収集を実施している。現在，1648 種のホスフィン配位子を持つパラジウム錯体の構造と素反応の中間体データの収集まで完了している。
- b) 従来，ポテンシャルエネルギー曲面（PES）上における分子構造の探索には，量子化学計算によって求めたエネルギーとエネルギー勾配が使われてきた。だが，エネルギー計算を量子コンピュータ上での測定に置き換えた場合，エネルギー値には測定誤差が含まれるので滑らかな PES が描けない，つまり，従来のエネルギー勾配を用いる構造探索法が適用できないという問題が出てきた。この問題に対処するために，我々は，機械学習的手法の一つであるベイズ最適化（BO）を用いて光機能発現の鍵となる最安定円錐交差点を探索する手法の開発を行い，エチレンやホルムアルデヒド，ベンゼンなどの小分子の最安定円錐交差点構造を精度良く求めることに成功した。

B-1) 学術論文

T. YOSHIMURA, H. KATO, S. OIKAWA, T. INAGAKI, S. ASANO, T. SUGAWARA, T. MIYAO, T. MATSUBARA, H. AJIRO, M. FUJII, Y. OHNISHI and M. HATANAKA, “CopDDB: A Descriptor Database for Copolymers and Its Applications to Machine Learning,” *Digital Discovery* **4**, 195–203 (2025). DOI: 10.1039/D4DD00266K

R. SOMAKI, T. INAGAKI and M. HATANAKA, “Exploration of the Global Minimum and Conical Intersection with Bayesian Optimization,” *Mol. Inf.* **44**(2), e202400041 (2025). DOI: 10.1002/minf.202400041

R. OHNO, K. OTA, N. NISHIMURA, K. TANIGUCHI, S. KUROKAWA, T. WAKABAYASHI, M. HATANAKA, A. ROSAS-SÁNCHEZ, D. HASHIZUME and T. MATSUO, “Silicon Analogues of Cyclopropyl Radical Derived from a Highly Stable Cyclic Disilene Compound Featuring a Si–Br Bond,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(36), 24911–24924 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c06111

- K. MUTO, M. HATANAKA, F. KAKIUCHI and T. KOCHI**, “Theoretical Studies on Relative Stability of Cationic 1,10-Phenanthroline Palladium Complexes Bearing Alkyl Groups by Using Designed Alkane Templates,” *Organometallics* **43**(14), 1528–1535 (2024). DOI: 10.1021/acs.organomet.4c00097
- S. KANNO, H. NAKAMURA, T. KOBAYASHI, S. GOCHO, M. HATANAKA, N. YAMAMOTO and Q. GAO**, “Quantum Computing Quantum Monte Carlo with Hybrid Tensor Network for Electronic Structure Calculations,” *npj Quantum Inf.* **10**, 56 (2024). DOI: 10.1038/s41534-024-00851-8
- A. WAKIUCHI, S. JASIAL, S. ASANO, R. HASHIZUME, M. HATANAKA, Y. OHNISHI, T. MATSUBARA, H. AJIRO, T. SUGAWARA, M. FUJII and T. MIYAO**, “Multiple Comonomer Concentrations Prediction from FTIR Spectra with Quantum Chemistry-Based Interpretation,” *MRS Commun.* **14**, 439–444 (2024). DOI: 10.1557/s43579-024-00568-x

B-4) 招待講演

- M. HATANAKA**, “A descriptor database for metal-phosphorus complexes to evaluate the catalytic abilities using machine learning,” The 8th Japan-Czech-Slovakia (JCS) International Symposium on Theoretical Chemistry, Sapporo (Japan), June 2024.
- M. HATANAKA**, “Understanding and Designing Lanthanide Photofunctional Materials,” The 8th ICRDD International Symposium + Rising Star Program, Sapporo (Japan), October 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

理論化学会幹事 (2022–).

日本化学会関東支部幹事 (2023–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 ACT-X アドバイザー (2023–).

文部科学省量子科学技術委員 (2023–).

文部科学省 科学技術・学術政策研究所 (NISTEP) 専門調査員 (2019–).

理科教育活動

総合学習, 横浜雙葉高等学校 (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

慶應義塾大学理工学部, 「化学A」, 2024年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「量子化学基礎」, 2024年10月–2025年1月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「分子量子化学」, 2024年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「電子状態理論」, 2024年10月–2025年1月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「物理化学演習第1」, 2024年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「物理化学演習第2」, 2024年10月–2025年1月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「化学実験第1」, 2024年4月–7月.

B-10) 競争的資金

科研費学術変革領域研究(A),「金属錯体触媒データベースの構築による触媒開発の加速」, 畑中美穂 (2024年度–2025年度).

科研費基盤研究(A),「電解発生活性化学種の利用による新物質変換系の構築」(代表: 栄長泰明), 畑中美穂 (研究分担者) (2023年度–2025年度).

B-11) 産学連携

共同研究, ダイキン工業(株),「自動反応経路探索 GRRM プログラムに基づく計算化学と機械学習を活用した触媒配位子を提案するシステムの開発」, 畑中美穂 (2020年度–2024年度).

共同研究, DIC (株),「マテリアルズインフォマティクス(MI)活用によるアルキド樹脂用非コバルトドライヤの開発」, 畑中美穂 (2018年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

遷移金属錯体触媒の特徴量として、錯体構造とモデル分子との素反応で得られる生成物のデータ収集を完了したため、次は、遷移状態のデータ収集に取り掛かる。触媒の作用は遷移状態を安定化することであるため、遷移状態の安定性が、触媒に対する最も良い特徴量となると期待している。遷移状態を含む特徴量データベースの構築が完了し次第、触媒反応の実験結果の予測ができるか検証すべく、実験グループとの共同研究を開始する予定である。

4-9 社会連携研究部門

平等 拓範（特任教授（クロスアポイントメント*））（2019年4月1日着任）

佐野 雄二（特命専門員）

竹家 啓（特任准教授）

YAHIA, Vincent（特任研究員）

鈴木 昌世（特任研究員）

角谷 利恵（特任専門員）

殖栗 敦（特任専門員）

CASSOURET, Florent（特任研究員）

BRUNETEAU, Baptiste（特任研究員）

LIM, Hwanhong（共同研究員）

花村 諭志（共同研究員）

吉田 光宏（特別訪問教授）

石月 秀貴（特別訪問研究員）

佐藤 庸一（特別訪問研究員）

瀧上 浩幸（特別訪問研究員）

KAUSAS, Arvydas（特別訪問研究員）

田村 彰良（特別訪問研究員）

PERY, Mattin（インターンシップ）

MILAN, Fayat（インターンシップ）

松田 美帆（技術支援員（派遣（理研）））

小林 純（技術支援員（派遣））

水嶋 一彦（技術支援員（派遣（理研）））

伊吹 剛（技術支援員（派遣（理研）））

小野 陽子（事務支援員）

奥原 紀恵（事務支援員（派遣））

*理化学研究所放射光科学研究センター

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グラフィの展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

分子科学に関連して重要な波長域にレーザーの高輝度光を展開する為の固体レーザー，非線形波長変換法につき包括的な研究を進めている。特には近年のマイクロ固体フォトリソグラフィ [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），バルク擬似位相整合（QPM）素子：大口径周期分極

反転 $\text{MgO}:\text{LiNbO}_3$ (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, 新たなフォニクスを創出できるものと期待している。
- b) 光の発生, 増幅, 変換の高度制御を可能とする為の研究として, 希土類イオンの発光・緩和機構の解明, 固体中の光, エネルギー伝搬, さらにはマイクロドメイン構造と光子及び音子の相互作用機構解明, 非線形光学過程の解明, モデル化を進めている。Yb レーザーの機構解明, Nd レーザーの直接励起可能性, 希土類レーザーの励起光飽和特性, YVO_4 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 μm), 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 μm 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ニクスで実証した。アト秒発生に重要な中赤外 OPCPA では, LA-PPMgLN を用い波長 2.1 μm 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。一方, DFC チップでは常温にてサブナノ秒で 2.8 J の 1 μm 光発生に成功しており尖頭値で 3.5 GW に達する。フルエンスでは, 1.12 J/cm², 1.56 GW/cm² にも達するもので世界記録になる。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幅広い展開が期待される。

B-1) 学術論文

K. TAMURA, R. NAKANISHI, H. OHBA, T. KARINO, T. SHIBATA, T. TAIRA and I. WAKAIDA, “Development of a Radiation Tolerant Laser-Induced Breakdown Spectroscopy System Using a Single Crystal Micro-Chip Laser for Remote Elemental Analysis,” *J. Nucl. Sci. Technol.* **61**(8), 1109–1116 (2024). DOI: 10.1080/00223131.2023.2298485

B. S. HETTIARACHCHI, Y. TAKAOKA, Y. UETAKE, Y. YAKIYAMA, H. H. LIM, T. TAIRA, M. MARUYAMA, Y. MORI, H. Y. YOSHIKAWA and H. SAKURAI, “Uncovering Gold Nanoparticle Synthesis Using a Microchip Laser System through Pulsed Laser Ablation in Aqueous Solution,” *Ind. Chem. Mater.* **2**, 340–347 (2024). DOI: 10.1039/d3im00090g

- V. YAHIA, A. KAUSAS, A. TSUJI, M. YOSHIDA and T. TAIRA**, “Joule-Class Sub-Nanosecond Pulses Produced by End-Pumped Direct Bonded YAG/Sapphire Modular Amplifier,” *Opt. Express* **32**(8), 14377–14393 (2024). DOI: 10.1364/OE.518251
- N. H. MATLIS, H. T. OLGUN, C. RENTSCHLER, K. RAVI, T. TAIRA, H. ISHIZUKI and F. X. KÄRTNER**, “Scaling Narrowband THz Generation to Large Apertures in LiNbO₃ and KTP,” *Opt. Express* **32**(19), 33875–33893 (2024). DOI: 10.1364/OE.533354
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Characterization of Crystal Quartz for QPM Wavelength-Conversion Device,” *Opt. Express* **32**(27), 48491–48499 (2024). DOI: 10.1364/OE.539371
- Y. SATO, T. TAKEMASA and T. TAIRA**, “Comprehensive Thermal Properties of Y₃Al₅O₁₂ from 160 K to 500K,” *Opt. Express* **33**(5), 9479–9488 (2025).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Nd³⁺-Doping in Al³⁺-Site of α -Al₂O₃ as a Raw Material of Nd:Sapphire Laser Ceramics,” *Opt. Express* **33**(6), 13077–13086 (2025).

B-2) 国際会議のプロシーディングス他

- K. TAKEYA, V. YAHIA, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Terahertz Differential Frequency Generation Via Narrow Linewidth Dual Wavelength Light Obtained By Degenerated OPO-VBG System,” *49th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz 2024)* (2024).
- K. HIROSAWA, N. OHATA, A. KAUSAS, V. YAHIA and T. TAIRA**, “2-J, 20-Hz Pulse Laser System Operating at Room Temperature and Wavelength Conversion to 266 nm,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, ATu1A.4 (2024).
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Nd³⁺-doping into Al³⁺-site in bulk-shaped α -Al₂O₃,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, JTu2A.11 (2024). (poster)
- A. OSANAI, A. KAUSAS and T. TAIRA**, “Laser Induced Damage Evaluation for Laser Material Development,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, JTu2A.18 (2024). (poster)
- K. TAKEYA, V. YAHIA, H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Amplification of narrow linewidth 2-wavelength light for THz wavelength conversion,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, JW2A.16 (2024). (poster)
- H. ISHIZUKI and T. TAIRA**, “Wavelength-tunable, dual 2 μ m light source for high-brightness THz-wave generation,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, JW2A.33 (2024). (poster)
- B. BRUNETEAU, H. H. LIM and T. TAIRA**, “Highly-stable 1064 nm laser for high-fidelity quantum-operations,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, JW2A.37 (2024). (poster)
- B. BRUNETEAU, B. FAURE, J. DEBRAY, P. SEGONDS, T. TAIRA and B. BOULANGER**, “Singly Resonant Infrared Tunable Optical Parametric Oscillator Based on a Cylindrical 5%MgO:PPLN Crystal Pumped by a 1064 nm Sub-nanosecond Microchip Laser,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, AW4A.3 (2024).
- F. CASSOURET, Y. SATO, A. KAUSAS and T. TAIRA**, “Room temperature bonded Cr:LiSAF crystal for high-power broadband laser,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, AW5A.1 (2024).
- Y. SATO, A. KAUSAS and T. TAIRA**, “Improved effective thermal conductivity of DFC-PowerChip fabricated by il-SAB,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, AW5A.3 (2024).

Y. SATO and T. TAIRA, “Augmentation of the emission bandwidth by spectrum tailoring with Nd-doped garnets and bixbyites,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, AW5A.4 (2024).

V. YAHIA, A. KAUSAS, H. ODAKA and T. TAIRA, “25 Hz, 2 J pulses generated by DFC-PowerChip Amplifier,” *Advanced Solid State Lasers (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, ATh1A.7 (2024).

M. YOSHIDA, A. KAUSAS, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, Z. R. RUI and X. ZHOU, “Yb:YAG Fiber, Disk and DFC Hybrid Amplifier for DFG THz generation,” *Laser Applications, Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, LTh1B.2 (2024). (Invited)

Y. SATO, A. KAUSAS and T. TAIRA, “Improvement of the effective thermal conductivity in DFC-PowerChip for highly intense laser gain media,” *2024 8th International Workshop on Low Temperature Bonding for 3D Integration (LTB-3D 2024)*, 31P-02 (2024).

A. KAUSAS and T. TAIRA, “Performance Optimization of Gigawatt-Class DFC-PowerChip Laser System through Bonding Technology,” *2024 8th International Workshop on Low Temperature Bonding for 3D Integration (LTB-3D 2024)*, 30O-08 (2024).

B-3) 総説, 著書

平等拓範, 「先端レーザーを支える材料技術」特集号によせて, *レーザー研究*, **53(2)** (「先端レーザーを支える材料技術」特集号), pp. 58–59 (2025).

A. KAUSAS and T. TAIRA, “Room Temperature Bonded Structures for Novel Laser Devices,” *The Review of Laser Engineering*, **53(2)** (Special Issue on “Material Science toward the Extreme Lasers”), pp. 79–82 (2025). (in Japanese)

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

A. KAUSAS and T. TAIRA, “DFC-chip Tiny Integrated Laser,” The 10th Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2024), OPIC 2024, Yokohama (Japan) (Hybrid), April 2024.* (Keynote)

I. WAKAIDA, H. OHBA, K. AKAOKA, T. KARINO, R. NAKANISHI, K. SAKAMOTO, Y. IKEDA and T. TAIRA, “‘TILA’ application in severe environments as a powerful tool for in-situ remote analysis of fuel debris in decommissioning of Fukushima Daiichi Nuclear Power Station,” The 10th Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2024), OPIC 2024, Yokohama (Japan) (Hybrid), April 2024.

平等拓範, 「マイクロ固体フォトンクスと光量子技術のもつれ」, 「光量子センシング社会実装コンソーシアム (KU-PhotonIQS)」2024年度年次総会, 京都大学, 京都, 2024年6月.

平等拓範, 「マイクロチップレーザーの可視光応用」, 日本光学階レーザーディスプレイ技術研修会, あうら橋, 神奈川県箱根町, 2024年7月.

平等拓範, 「小型集積パワーチップレーザー」, 第48回レーザ協会セミナー「自動車業界におけるレーザ加工の現在と未来」, 東京都立産業貿易センター, 東京, 2024年10月.

M. YOSHIDA, A. KAUSAS, H. ISHIZUKI, T. TAIRA, Z. R. RUI and X. ZHOU, “Yb:YAG Fiber, Disk and DFC Hybrid Amplifier for DFG THz generation,” *Laser Applications, Optica Laser Congress & Exhibition 2024*, Grand Prince Hotel Osaka Bay, Osaka (Japan), October 2024.

T. TAIRA, “Tiny Integrated PowerChip Laser for LIBS,” Joint International Conferences on Post-CSI/ASLIBS2023 and The 9th Symposium on Applications of Advanced Measurement Technologies (SAAMT)2024, AOSSA, Fukui (Japan), December 2024.* (Keynote)

平等拓範,「直接接合による小型集積極限パワーレーザー」,日本学術振興会第R032産業イノベーションのための結晶成長委員会第19回研究会,名古屋大学,名古屋,2025年1月.

平等拓範,「DFC パワーチップによる小型集積レーザーの可能性」,微小光学研究会(応用物理学会)第174回研究会,早稲田大学,東京,2025年3月.

平等拓範,「マイクロチップレーザーから小型集積レーザーへ」,一般社団法人ワイドギャップ半導体学会(WideG),第20回研究会,コモレ四谷,東京(ハイブリッド開催),2025年3月.

B-6) 受賞, 表彰

T. TAIRA, Research.com Engineering and Technology in Japan, Leader Award (2024).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

レーザー学会研究会委員(1999-),「小型集積レーザー」技術専門委員会主査(2021-2025).

光産業技術振興協会光材料・応用技術研究会幹事(2004-), 多元技術融合光プロセス研究会幹事(2009-).

日本光学会レーザーディスプレイ技術研究グループ実行委員(2015-), 光エレクトロニクス産学連携専門委員会学会委員及び主査(2020.4-), 生体ひかりイメージング産学連携専門委員会委員及び幹事(2022-2026).

米国光学会 The Optical Society (OSA) フェロー(2010-).

国際光工学会 The International Society for Optical Engineering (SPIE) (米国) フェロー(2012-).

米国電気電子学会 The Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE) フェロー(2014-).

The International Academy of Photonics and Laser Engineering (IAPLE) フェロー(2018-).

OPTICA(Formerly OSA), 会議評議員(Meetings Council)(2023-).

(公財)天田財団理事(2023-).

学会の組織委員等

SPIE Photonics West, LASE, 国際会議委員会共同議長(米国, サンフランシスコ)(2019-2024).

CLEO/Europe, Solid-State Lasers, 国際会議プログラム委員会委員(ドイツ, ミュンヘン)(2022-2024).

9th International Symposium on Optical Materials (IS-OM'9), 国際会議諮問委員(スペイン, タラゴナ)(2023-).

Advanced Solid State Laser Conference (ASSL), 国際会議プログラム委員会委員(Materials Program Committee)(2017-).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業ACT-X 研究領域「リアル空間を強靱にするハードウェアの未来」領域アドバイザー(2021-).

学会誌編集委員

Applied Sciences (<https://www.mdpi.com/journal/applsci>, ISSN 2076-3417), MDPI, 編集委員会委員(2021-2024).

“*Tiny Integrated Lasers and Their Application to Industrial Laser Technologies (TILA-LIC 2024)*,” *Feature Issue in Optics Express* (2025), Lead Editor (2024).

その他

ハイティラ株式会社CTO(2023-).

B-8) 大学等での講義, 客員

核融合科学研究所, 客員教授, 2023 年 -.

B-10) 競争的資金

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」(代表: 公益財団法人高輝度光科学研究センター熊谷教孝(2017年度-2020年度), 自然科学研究機構佐野雄二(2021年度-2026年度)), 平等拓範(再委託)(2017年度-2026年度).

安全保障技術研究推進制度, 「ジャイアント・マイクロフォトンクスによる高出力極限固体レーザー」, 平等拓範(2020年度-2024年度).

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年度-2027年度).

安全保障技術研究推進制度, 「超小型ロバストテラヘルツ波イメージング装置の研究開発」(代表: 南出泰丞), 平等拓範(研究分担者)(2020年度-2024年度).

科学技術振興機構ムーンショット型研究開発事業, 「2050 年までに, 経済・産業・安全保障を飛躍的に発展させる誤り耐性型汎用量子コンピュータを実現」(代表: 大森賢治), 「高安定・高強度小型集積レーザーシステムの研究開発」, 平等拓範(研究分担者)(2023年度-2025年度).

日本原子力研究開発機構廃炉・汚染水対策事業費補助金, 「燃料デブリの性状把握のための分析・推定技術の開発」(代表: 若井田育夫), 「DFC 型高出力マイクロチップレーザーの開発に関する研究」, 平等拓範(研究分担者)(2023年度-2024年度).

B-11) 産学連携

共同研究, トヨタ自動車(株), 「量子光源の研究 2」, 平等拓範(2024年度).

共同研究, 三菱電機(株), 「小型集積化に向けた高強度レーザー光源研究開発」, 平等拓範(2022年度-2024年度).

共同研究, (株)ハナムラオプティクス, 「ジャイアントパルス・マイクロチップレーザーによる波長変換」, 平等拓範(2023年度-2024年度).

共同研究, ハイティラ(株), 「接合型小型集積レーザーの研究」, 平等拓範(2023年度-2024年度).

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できると期待される。しかし, その加速のための高強度レーザーが非常に大型であることが深刻な問題となり, 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, レーザー加速による小型加速器の構築を目指すと共に, レーザー加速に資する先端レーザー科学を, 別途, 社会連携研究, 小型集積レーザー(TILA, Tiny Integrated Laser)コンソーシアムにて製造, 医療, 量子コンピュータ, 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。

4-10 研究施設等

機器センター

湊 丈俊（主任研究員）（2020 年 6 月 1 日着任）

兵藤 由美子（事務支援員）

A-1) 専門領域：表面界面科学，エネルギー変換，物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 走査プローブ顕微鏡の高度化と物性・反応機構の解明
- b) 電極／電解液界面におけるエネルギー変換の機構解明
- c) 環境触媒の反応機構解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 温度は化学反応に大きな影響を与える要因の一つであり，液中での走査プローブ顕微鏡（SPM）測定においても精密な温度制御が求められる。しかし，氷点下環境での高分解能測定はこれまで報告されていなかった。本研究では，試料周辺の温度を制御する機構を構築し測定を試みたが，探針との温度差が原因で安定した測定が困難だった。そこで，測定システム全体を均一に温度制御する新たなシステムを開発し，世界で初めて液中における氷表面の高分解能測定に成功した。本成果は，大西洋教授（神戸大学・分子科学研究所）との共同研究によるものである。さらに，湿度を制御しながら測定可能な SPM システムを開発し，ナノ水滴の特異な凝着力を検出することにも成功した。湿度変化がナノスケールの液体挙動に及ぼす影響を詳細に解析し，ナノ水滴の凝着メカニズムに関する新たな知見を得た。本研究は，荒木優希助教（金沢大学）との共同研究として実施された。これらの成果は，低温環境下や湿度制御下でのナノスケール測定技術の発展に寄与し，エネルギー材料研究や界面科学分野への応用が期待される。
- b) リチウムイオン電池は，小型電子機器や電気自動車など幅広い分野で利用されているが，さらなる高性能化と環境負荷の低減が求められている。本研究では，アニオンの移動を利用した新型蓄電池の開発と，その反応メカニズムの解明に取り組んでいる。今年度は，環境循環型の電解液と電極を発見し，X線回折（XRD），X線光電子分光（XPS），電子顕微鏡などを用いて詳細に分析した。また，走査型プローブ顕微鏡（SPM）を活用し，ナノスケールでの反応メカニズムを調査した。これらの成果は，新たな蓄電池技術の発展に貢献し，持続可能なエネルギー貯蔵システムの実現に寄与するものである。
- c) 大気中の二酸化炭素濃度の増加という環境問題に対処するため，低温でのメタン化反応において高いメタン収率を得ることを目指し，La と Zr を添加した Ni/CeO₂ 触媒の研究を行った。触媒を合成し，その触媒活性と物性を詳細に解析した。その結果，La を添加した触媒が，より大きな表面積と十分な酸素空孔，そして高い Ni 分散性を示し，低温でのメタン化において優れた性能を発揮することが明らかになった。本研究は，タイの Khon Kaen 大学との共同研究である。

B-1) 学術論文

M. KOBAYASHI, J. TAKAHASHI, H. OTA, K. MATSUO, M. I. A. IBRAHIM, T. MINATO, G. FUJIMORI, M. KATOH, K. KOBAYASHI, Y. KEBUKAWA and H. NAKAMURA, “Emergence of Optical Activity and Surface Morphology Changes in Racemic Amino Acid Films Under Circularly Polarized Lyman- α Light Irradiation,” *Chirality* **36(11)**, e70004 (2024). DOI: 10.1002/chir.70004

J. P. ITHIKKAL, K. FUKUTANI, F. NISHINO, T. MINATO, H. ISHII, S. IZAWA, K. TANAKA, M. HIRAMOTO and S. KERA, “Direct Observation of the Electronic Structure and Many-Body Interactions of Low-Mobility Carriers in Perylene Diimide Derivative,” *Appl. Phys. Lett.* **125(5)**, 052102 (2024). DOI: 10.1063/5.0221293

R. YANAGISAWA, T. UEDA, K. NAKAMOTO, Z. LU, H. ONISHI and T. MINATO, “The Interface between Ice and Alcohols Analyzed by Atomic Force Microscopy,” *J. Chem. Phys.* **161(2)**, 024702 (2024). DOI: 10.1063/5.0211501

Y. ARAKI, T. MINATO and T. ARAI, “Microscopic Behavior of Nano-Water Droplets on a Silica Glass Surface,” *Sci. Rep.* **14(1)**, 10693 (2024). DOI: 10.1038/s41598-024-61212-1

S. TSUBOKURA, S. KAWANO, Y. IMAI, T. UEDA, K. NAKAMOTO, H. NOMA, H. HIOKI and T. MINATO, “Development of a Method for Analyzing the Positional Correlation of Local Structures in Scanning Probe Microscopy Images Using Template-Matching Image-Processing Method,” *Appl. Phys. Express* **17(3)**, 035003 (2024). DOI: 10.35848/1882-0786/ad2784

B-4) 招待講演

湊 丈俊, 「原子間力顕微鏡を用いた蓄電池の電極と電解液の界面における物性と反応機構の in-situ 解析」, ブルカージャパンナノ表面計測事業部 AFM ミーティング【関西】AFM を用いた電池特性評価技術, 大阪, 2024 年 10 月.

荒木優希, 湊 丈俊, 新井豊子, 「FM-AFM によるナノスケロピックなぬれのその場観察」, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会シンポジウム: 異分野に広がる界面ナノ電子化学～最先端半導体からバイオサイエンスまで～, 新潟, 2024 年 9 月.

T. MINATO, “Reaction Mechanism at Interface between Electrode and Electrolyte Analyzed by Scanning Probe Microscopy,” The 12th Vacuum and Surface Sciences Conference of Asia and Australia, Taipei (Taiwan), October 2024.

T. MINATO, “Breaking Boundaries,” Special Lecture, Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, Kohn Kaen University, Kohn Kaen (Thailand), September 2024.

T. MINATO, “Surface & Interface Sciences in Energy Conversion Materials,” International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) MONGOLIA 2024, Ulaanbaatar (Mongolia), September 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会 代議員 (2023–2025).

International Union for Vacuum Science, Technique and Applications (IUVSTA)-Japan 国際連携委員会委員 (2023–).

Applied Surface Science Division, International Union for Vacuum Science, Technique and Applications (IUVSTA)-Japan, Vice Chair (2023–).

日本表面真空学会 国際連携委員会委員 (2024–2025).

次世代ナノプローブ技術委員会 運営委員 (2024–2025).

日本表面真空学会マイクロビームアナリシス技術部会 幹事 (2024–2025).

学会の組織委員等

日本表面真空学会 ISSS-10 プログラム委員会委員 (2022–2025).

The 34th Thai Institution of Chemical Engineering and Applied Chemistry International Conference International Scientific Committee (2024–2025).

ALC'24組織委員会 ALC'24 プログラム委員 (2023–2025).

学会誌編集委員

e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Associate Editor (2024–2025).

その他

青森県三戸町ふるさと応援大使 (2021–2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

Kohn Kaen University, Department of Chemical Engineering, Inbound Visiting Scholar, “Instrumental Analysis,” 2024年9月–12月.

Khon Kaen University, Inbound Visiting Scholar, 2024年9月–12月.

B-10) 競争的資金

自然科学研究機構 Open Mix Lab (OML) 公募研究プログラム (テーマ設定型), 「アニオン移動型革新型蓄電池反応の研究」, 湊 丈俊 (2023年度–2024年度).

科研費基盤研究(C), 「ガラス上のナノ水滴の構造観察による微視的ぬれの解明」 (代表者: 荒木優希), 湊 丈俊 (研究分担者) (2023年度–2025年度).

中村 敏和（チームリーダー）
（研究力強化戦略室特任部長（研究戦略担当））

B-1) 学術論文

T. ISHIZAKI, M. ASADA, T. NAKAMURA and T. OZEKI, “Spin Coherence Phenomena of an $S = 1/2$ Copper(II) System in a Polyoxometalate with a Less-Abundant Nuclear Spin,” *Dalton Trans.* **54(9)**, 3581–3585 (2024). DOI: 10.1039/D4DT02832E

T. FUJINO, R. KAMEYAMA, K. ONOZUKA, K. MATSUO, S. DEKURA, T. MIYAMOTO, Z. GUO, H. OKAMOTO, T. NAKAMURA, K. YOSHIMI, S. KITOU, T. ARIMA, H. SATO, K. YAMAMOTO, A. TAKAHASHI, H. SAWA, Y. NAKAMURA and H. MORI, “Orbital Hybridization of Donor and Acceptor to Enhance the Conductivity of Mixed-Stack Complexes,” *Nat. Commun.* **15(1)**, 3028 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-47298-1

M. INOUE, A. YAMAUCHI, B. PARMAR, K. ORIHASHI, M. SINGH, M. ASADA, T. NAKAMURA and N. YANAI, “Guest-Responsive Coherence Time of Radical Qubits in a Metal-Organic Framework,” *Chem. Commun.* **60(48)**, 6130–6133 (2024). DOI: 10.1039/D4CC01564A

A. YAMAUCHI, S. FUJIWARA, N. KIMIZUKA, M. ASADA, M. FUJIWARA, T. NAKAMURA, J. PIRILLO, Y. HIJIKATA and N. YANAI, “Modulation of Triplet Quantum Coherence by Guest-Induced Structural Changes in a Flexible Metal-Organic Framework,” *Nat. Commun.* **15(1)**, 7622 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-51715-w

B-4) 招待講演

中村敏和, 「機能性分子集合体の磁気共鳴研究」, 第 63 回電子スピンサイエンス学会, 福井市, 2024 年 11 月.

T. NAKAMURA, “ESR Study of Functional Molecular System,” International Workshop “Modern developments and applications of ESR, THz and high magnetic fields,” Kobe (Japan), September 2024.

B-6) 受賞, 表彰

中村敏和, 電子スピンサイエンス学会学会賞 (2024).

B-7) 学会および社会的活動

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

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 (2018–2025).

科学技術振興機構大学発新産業創出基金事業及び研究成果展開事業外部専門家 (2023–2025).

科学技術振興機構創発的研究支援事業事前評価外部専門家 (2023–2025).

文部科学省科学技術・学術政策局 科学技術・学術審議会人材委員会外部有識者 (2024).

文部科学省科学技術・学術政策局 科学技術・学術審議会臨時委員 (2024–2025).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「凝縮系のスピンドコヒーレンスを支配しているものは何か？」中村敏和 (2024 年度–2027 年度).

鈴木 敏泰（チームリーダー）

B-1) 学術論文

K. TAKEDA, N. OHTSUKA, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Prediction Method for Reaction Yield of Deuteration of Polyfluoroperylene Using Generative AI Techniques,” *Comput.-Aided Chem. Eng.* **53**, 2689–2694 (2024). DOI: 10.1016/b978-0-443-28824-1.50449-x

N. OHTSUKA, H. OTA, S. SUGIURA, S. KAKINUMA, H. SUGIYAMA, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Perfluorohalogenated Naphthalenes: Synthesis, Crystal Structure, and Intermolecular Interaction,” *CrystEngComm* **26**, 764–772 (2024). DOI: 10.1039/d3ce01124k

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「フッ素化ペリレン化合物の合成とデバイスへの応用」, 鈴木敏泰 (2023年度–2025年度).

科研費学術変革領域研究(A), 「デジタル化による高度精密有機合成の新展開」(代表: 大嶋孝志), 鈴木敏泰 (研究分担者) (2021年度–2025年度).

計算科学研究センター（ネットワーク担当）

大野 人侍（准教授）（1996年4月1日着任，2019年10月1日昇任）

A-1) 専門領域：情報科学，ネットワーク運用技術及びサイバーセキュリティ

A-2) 研究課題：

- a) ソフトウェアを用いたネットワークの自動制御
- b) ログ解析等によるネットワーク／サイバーセキュリティの自動最適化及び認証
- c) a), b) への AI の応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ORION2022（Okazaki Research Institutes Organization Network）において，Google Workspace 等のパブリッククラウドサービスの利用を前提としたゼロトラスト・アーキテクチャを取り入れたシステム構築を行い，従来の ORION 主認証システムを拡張し，ゼロトラストを実現する認証基盤とした。ORION2022 主認証システムは，ORION へのネットワーク接続時の定期的な端末及びユーザ認証，VPN 接続時ユーザ認証や管理システムなどのシステム及びパブリック SaaS（Google Workspace 及び Microsoft Office365）のユーザ認証に利用され MFA 及びシングルサインオン機能を提供している。現在，ORION2022 運用期間中の安全なシステム利用継続のための近代化改修を行っている。更に，自然科学研究機構における統合認証基盤構築を行う機構タスクフォースの一員としてシステム化のための調査研究を行うと共に，評価用システムの開発に着手している。
- b) ORION2022 で導入した器機及びサービスでは API の提供を原則求めており，提供された API によりログやイベントなどの自動取得や処理の自動化，器機／サービス間連携を行えるようになっている。また，標準で提供されていない機能についても API とローカルプログラムを組み合わせる柔軟に提供している。現在，その適用範囲を広げるシステム開発を行っている。また，機構情報セキュリティ基本計画にもログをプロアクティブに活用する目標が示されており今後はそれに沿った開発を行っていくことを検討している。
- c) a), b) についてより効果的な利活用が行えるように AI の適用について踏査を行っており，予備的な評価システムの構築運用を行っている。

B-7) 学会および社会的活動

その他

総合研究大学院大学情報セキュリティアドバイザー (2024–2025).

C) 研究活動の課題と展望

ORION におけるユーザや端末の認証と認可の統一化を引き続き推進していく。ORION2022 は，クラウド等 ORION 外部のサービスを含んだ統合型ユーザ／端末管理・認証基盤，現在のログ解析基盤を拡張発展させクラウド・ログを取り込み ORION とクラウドの一貫した取扱と分析を可能とする情報セキュリティ・インシデント対応基盤やそれらを統合し自動制御するシステムとして設計，仕様化し調達を行い運用している。更に，API によるシステム間連携

が行えるようになっているため、APIを用いた各システム間の連携や独自機能の開発と運用開始と機能拡張をおこなっている。現在、この環境を機構全体に広げるために自然科学研究機構統合認証基盤構築へ向け機構認証基盤タスクフォースメンバーとして踏査研究を推進すると共に評価システムの開発やプロアクティブに情報を活用する検討を行っていく。

また、AIの応用に向けた調査等を行っている。

技術推進部及び安全衛生管理室

B-1) 学術論文

- Y. MIZUTA, D. SAKAKIBARA, S. NAGAHARA, I. KANESHIRO, T. T. NAGAE, D. KURIHARA and T. HIGASHIYAMA**, “Deep Imaging Reveals Dynamics and Signaling in One-To-One Pollen Tube Guidance,” *EMBO Rep.* **25**, 2529–2549 (2024). DOI: 10.1038/s44319-024-00151-4
- R. YANAGISAWA, T. UEDA, K. NAKAMOTO, Z. LU, H. ONISHI and T. MINATO**, “The Interface between Ice and Alcohols Analyzed by Atomic Force Microscopy,” *J. Chem. Phys.* **161**(2), 024702 (5 pages) (2024). DOI: 10.1063/5.0211501
- T. MATSUMOTO, T. NOGUCHI, A. MIYAKE, Y. IGAMI, M. MATSUMOTO, T. YADA, M. UESUGI, M. YASUTAKE, K. UESUGI, A. TAKEUCHI, H. YUZAWA, T. OHIGASHI and T. ARAKI**, “Sodium Carbonates on Ryugu as Evidence of Highly Saline Water in the Outer Solar System,” *Nat. Astron.* **8**(12), 1536–1543 (2024). DOI: 10.1038/s41550-024-02418-1
- J. A. LAUX, T. OHIGASHI, M. R. BITTERMANN, T. ARAKI, H. YUZAWA, F. RANCAN, A. VOGT and E. RÜHL**, “Scanning Transmission Soft X-Ray Microscopy Probes Topical Drug Delivery of Rapamycin Facilitated by Microneedles,” *ChemPhysChem* **26**(2), e202400819 (10 pages) (2025). DOI: 10.1002/cphc.202400819
- M. ODELIUS, S. D. FOLKESTAD, T. SAISOPA, Y. RATTANACHAI, W. SAILUAM, H. YUZAWA, N. KOSUGI, A. C. PAUL, H. KOCH and D. CÉOLIN**, “Symmetry Breaking around Aqueous Ammonia Revealed in Nitrogen K-Edge X-Ray Absorption,” *J. Phys. Chem. Lett.* **16**, 3411–3419 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpclett.4c03625

B-7) 学会および社会的活動

理科教育活動

国研セミナー「低温が創る世界，低温と超電導の不思議—低温の世界と物理法則を学習・体験する—」岡崎市理科部 (2024). (豊田朋範)

その他

学内演習「各種センサーで WAN-WAN を動かすまで」大阪大学大学院理学研究科 (2024). (豊田朋範)

WAN-WAN 実演セミナー「WAN-WAN 事例紹介—分子科学研究クリーンルーム—」東北大学大学院工学研究科 (2024). (豊田朋範)

中西電機工業(株) 研修講演「国立研究機関における研究支援業務とサプライヤー」分子科学研究所 (2025). (豊田朋範)

B-8) 大学等での講義，客員

岡野泰彬, 中部大学非常勤講師, 「基礎力学」および「力学」, 2024 年度春学期, 「基礎電磁気学」, 2024 年度秋学期.

客員研究部門及び退職・転出後等の成果論文
(所属に分子科学研究所を含む)

- S. A. SHAH, H. VALI, DAIJIRO OKAUE, K.-I. FUKUI, D.-S. YANG and S. BALDELLI**, “Surface Structure Characterization of Rubrene(001) Single Crystal with Sum Frequency Generation Spectroscopy and Reflection High-Energy Electron Diffraction,” *J. Chem. Phys.* **162**(1), 014701 (2025). DOI: 10.1063/5.0236513
- T. TSUCHIMOCHI**, “Double Configuration Interaction Singles: Scalable and Size-Intensive Approach for Orbital Relaxation in Excited States and Bond-Dissociation,” *J. Chem. Phys.* **161**(24), 241102 (2024). DOI: 10.1063/5.0243710
- M. KIRA, Y. SHIGA, K. NAKAGAWA, A. MATSUMOTO, K. TOKITA, Y. TERASAWA, K. ZHANG, K. TSUTAO, T. NAKANISHI, S. YOSHIDA, S. SATO, N. SHIBATA and T. ASAH**, “Chiral Inversion of Thalidomide During Crystal Growth by Sublimation,” *Cryst. Growth Des.* **24**(8), 3133–3139 (2024). DOI: 10.1021/acs.cgd.3c01030
- N. KOGA, Y. SAITO, K. MIYAKE, S. AMUTI, S. FUKUYOSHI, S. YOSHIDA, S. SATO, Y. YAMADA, A. IKEDA, N. ADACHI, M. KAWASAKI, A. TAKASU, S. ARAMAKI, T. SENDA, A. RAHIM, A. NAJIB, G. ALAM, N. TANAKA and K. NAKAGAWA-GOTO**, “Cyclic Sesquiterpene–Flavanone [4+2] Hybrids, Syzygioblanes A–C, Found in an Indonesian Traditional Medicine, ‘Jampu Salo’ (*Syzygium oblanceolatum*),” *Org. Lett.* **26**(20), 4302–4307 (2024). DOI: 10.1021/acs.orglett.4c01248
- X. ZHANG, H. HE, C. GE, Q. XIANG, S. SATO, M. LV, X. CHEN and Z. SUN**, “Crystallization-Induced Dimerization and Solution-Phase Bond Dissociation of Stable Dibenzoolympicenyl Radicals,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(6), e202418261 (2025). DOI: 10.1002/anie.202418261
- K. LI, S. YOSHIDA, R. YAKUSHIJI, X. LIU, C. GE, Z. XU, Y. NI, X. MA, J. WU, S. SATO and Z. SUN**, “Molecular Cylinders with Donor–Acceptor Structure and Swinging Motion,” *Chem. Sci.* **15**, 18832–18839 (2024). DOI: 10.1039/d4sc05849f
- Z. ZHOU, Y. YANG, J. LIANG, S. SATO, Z. ZHANG and Z. WEI**, “Stepwise Chemical Reduction of [4]Cyclo[4]helicenylene: Stereo Transformation and Site-Selective Metal Complexation,” *Precis. Chem.* **3**(1), 27–34 (2025). DOI: 10.1021/prechem.4c00064
- A. KANNO, R. TANIFUJI, S. YOSHIDA, S. SATO, S. MAKI-YONEKURA, K. TAKABA, J. KANG, K. TONO, K. YONEKURA and H. OGURI**, “Streamlined Modular Synthesis of Saframycin Substructure via Copper-Catalyzed Three-Component Assembly and Gold-Promoted 6-*endo* Cyclization,” *Beilstein J. Org. Chem.* **21**, 226–233 (2025). DOI: 10.3762/bjoc.21.14
- G. TAKEKAWA, Y. NAKASON, Y. KAMIYA, H. ASANUMA and M. TERAZIMA**, “Reaction and Interaction Dynamics of Azobenzene-Tethered DNA with T7 RNA Polymerase,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27**(6), 3302–3312 (2025). DOI: 10.1039/d4cp04080e
- A. MIZUNO, R. MATSUOKA, S. KIMURA, K. OCHIAi and T. KUSAMOTO**, “Spin-Correlated Luminescence of a Carbazole-Containing Diradical Emitter: Single-Molecule Magnetoluminescence and Thermally Activated Emission,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(27), 18470–18483 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c03972
- K. SONODA, S. SHIMOKAWA, S. SUZUKI, T. KUSAMOTO and A. UEDA**, “Boron-Bridged Bis(tetrathiafulvalene) Zwitterionic Neutral Radical Conductors: Substituent Effects on Intramolecular and Intermolecular Electronic Interactions and Physical Properties,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **97**(10), uoae107 (2024). DOI: 10.1093/bulcsj/uoae107
- H. IZU, M. KONDO, M. OKAMURA, M. TOMODA, S. K. LEE, T. AKAI, V. K. K. PRANEETH, M. KANAIKE, S. KAWATA and S. MASAOKA**, “Precise Manipulation of Electron Transfers in Clustered Five Redox Sites,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **63**(47), e202408514 (2024). DOI: 10.1002/anie.202408514
- R. M. STROUD, J. BAROSCH, L. BONAL, K. BURGESS, G. D. CODY, B. T. DE GREGORIO, L. DALY, E. DARTOIS, E. DOBRICÁ, J. DUPRAT, C. ENGRAND, D. HARRIES, M. HASHIGUCHI, H. ISHII, Y. KEBUKAWA, A. D. KILCOYNE,**

F. LANGENHORST, M. R. LEE, L. R. NITTLER, E. QUIRICO, T. OKUMURA, L. REMUSAT, S. SANDFORD, H. YABUTA, M. ABE, N. M. ABREU, P. A. J. BAGOT, P. BECK, L. BEJACH, P. A. BLAND, J. C. BRIDGES, B. A. CYMES, A. DAZZI, F. DE LA PEÑA, A. DENISET-BESSEAU, S. ENJU, Y. ENOKIDO, D. R. FRANK, J. GRAY, M. HARUTA, S. HATA, L. HICKS, Y. IGAMI, D. JACOB, K. KAMIDE, M. KOMATSU, S. LAFORET, H. LEROUX, C. LE GUILLOU, Z. MARTINS, M. MARINOVA, J. MARTINEZ, J. MATHURIN, M. MATSUMOTO, T. MATSUMOTO, J. MATSUNO, S. MCFADZEAN, T. MICHIKAMI, I. MITSUKAWA, A. MIYAKE, M. MIYAHARA, A. MIYAZAKI, G. MONTAGNAC, S. MOSTEFAOUI, T. NAKAMURA, A. NAKATO, H. NARAOKA, Y. NAKAUCHI, S. NAKAZAWA, M. NISHIMURA, T. NOGUCHI, K. OHTAKI, T. OHIGASHI, T. OKADA, S. OKUMURA, R. OKAZAKI, T. H. V. PHAN, R. REBOIS, K. SAKAMOTO, T. SAIKI, H. SAITO, Y. SETO, M. SHIGENAKA, W. SMITH, H. SUGA, M. SUN, S. TACHIBANA, Y. TAKAHASHI, Y. TAKEICHI, A. TAKEUCHI, A. TAKIGAWA, Y. TAMENORI, S. TANAKA, F. TERUI, M. S. THOMPSON, N. TOMIOKA, A. TSUCHIYAMA, Y. TSUDA, K. UESUGI, M. UESUGI, T. USUI, M. VERDIER-PAOLETTI, D. WAKABAYASHI, S. WATANABE, T. YADA, S. YAMASHITA, M. YASUTAKE, K. YOGATA, M. YOSHIKAWA, H. YURIMOTO, P.-M. ZANETTA, T. ZEGA and M. E. ZOLENSKY, “Electron Microscopy Observations of the Diversity of Ryugu Organic Matter and Its Relationship to Minerals at the Micro- to Nano-Scale,” *Meteorit. Planet. Sci.* **59**(8), 2023–2043 (2024). DOI: 10.1111/maps.14128

J. MATHURIN, L. BEJACH, E. DARTOIS, C. ENGRAND, A. DAZZI, A. DENISET-BESSEAU, J. DUPRAT, Y. KEBUKAWA, H. YABUTA, L. BONAL, E. QUIRICO, C. SANDT, F. BORONDICS, J. BAROSCH, P. BECK, G. D. CODY, B. T. DE GREGORIO, M. HASHIGUCHI, D. A. L. KILCOYNE, M. KOMATSU, Z. MARTINS, M. MATSUMOTO, G. MONTAGNAC, S. MOSTEFAOUI, L. R. NITTLER, T. OHIGASHI, T. OKUMURA, V. T. H. PHAN, L. REMUSAT, S. SANDFORD, M. SHIGENAKA, R. STROUD, H. SUGA, Y. TAKAHASHI, Y. TAKEICHI, Y. TAMENORI, M. VERDIER-PAOLETTI, S. YAMASHITA, T. NAKAMURA, T. MORITA, M. KIKUIRI, K. AMANO, E. KAGAWA, T. NOGUCHI, H. NARAOKA, R. OKAZAKI, K. SAKAMOTO, H. YURIMOTO, M. ABE, K. KAMIDE, A. MIYAZAKI, A. NAKATO, S. NAKAZAWA, M. NISHIMURA, T. OKADA, T. SAIKI, S. TACHIBANA, S. TANAKA, F. TERUI, Y. TSUDA, T. USUI, S. WATANABE, T. YADA, K. YOGATA and M. YOSHIKAWA, “AFM-IR Nanospectroscopy of Nanoglobule-Like Particles in Ryugu Samples Returned by the Hayabusa2 Mission,” *Astron. Astrophys.* **684**, A198 (2024). DOI: 10.1051/0004-6361/202347435

N. IMAE, N. TOMIOKA, M. UESUGI, M. KIMURA, A. YAMAGUCHI, M. ITO, R. C. GREENWOOD, T. KAWAI, N. SHIRAI, T. OHIGASHI, C. PILORGET, J.-P. BIBRING, M.-C. LIU, K. UESUGI, A. NAKATO, K. YOGATA, H. YUZAWA, Y. KODAMA, M. YASUTAKE, K. HIRAHARA, A. TAKEUCHI, I. SAKURAI, I. OKADA, Y. KAROUJI, T. YADA, M. ABE and T. USUI, “Mineralogical Approach on Laboratory Weathering of Uncontaminated Ryugu Particles: Comparison with Orgueil and Perspective for Storage and Analysis,” *Meteorit. Planet. Sci.* **59**(7), 1705–1722 (2024). DOI: 10.1111/maps.14178

M. KOMATSU, H. YABUTA, Y. KEBUKAWA, L. BONAL, E. QUIRICO, T. J. FAGAN, G. D. CODY, J. BAROSCH, L. BEJACH, E. DARTOIS, A. DAZZI, B. DE GREGORIO, A. DENISET-BESSEAU, J. DUPRAT, C. ENGRAND, M. HASHIGUCHI, Z. MARTINS, J. MATHURIN, G. MONTAGNAC, S. MOSTEFAOUI, L. R. NITTLER, T. OHIGASHI, T. OKUMURA, L. RÉMUSAT, S. SANDFORD, R. STROUD, H. SUGA, Y. TAKAHASHI, Y. TAKEICHI, Y. TAMENORI, M. VERDIER-PAOLETTI, S. YAMASHITA, H. YURIMOTO, T. NAKAMURA, T. NOGUCHI, R. OKAZAKI, H. NARAOKA, K. SAKAMOTO, M. YOSHIKAWA, T. SAIKI, S. TANAKA, F. TERUI, S. NAKAZAWA, T. USUI, M. ABE, T. OKADA, T. YADA, M. NISHIMURA, A. NAKATO, A. MIYAZAKI, K. YOGATA, S. TACHIBANA, S. WATANABE and Y. TSUDA, “Raman Spectroscopy of Ryugu Particles and Their Extracted Residues: Fluorescence Background Characteristics and Similarities to CI Chondrites,” *Meteorit. Planet. Sci.* **59**(8), 2166–2185 (2024). DOI: 10.1111/maps.14234

A. B. VERCHOVSKY, F. A. J. ABERNETHY, M. ANAND, I. A. FRANCHI, M. M. GRADY, R. C. GREENWOOD, S. J. BARBER, M. SUTTLE, M. ITO, N. TOMIOKA, M. UESUGI, A. YAMAGUCHI, M. KIMURA, N. IMAE, N. SHIRAI, T. OHIGASHI, M.-C. LIU, K. UESUGI, A. NAKATO, K. YOGATA, H. YUZAWA, Y. KAROUJI, S. NAKAZAWA, T. OKADA, T. SAIKI, S. TANAKA, F. TERUI, M. YOSHIKAWA, A. MIYAZAKI, M. NISHIMURA, T. YADA, M. ABE, T. USUI, S. WATANABE, Y. TSUDA, N. MATSUDA, K. MCCAIN, T. LE PIVERT-JOLIVET, L. RIU, J. CARTER, D. LOIZEAU, J.-P. BEBRING, C. PILORGET, X. ZHAO, J. A. MALLEY, R. FINDLAY, I. OKADO, I. SAKURAI, K. HIRAHARA and N. SHIRAI, “A Primordial Noble Gas Component Discovered in the Ryugu Asteroid and Its Implications,” *Nat. Commun.* **15**(1), 8075 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-52165-0

C. PILORGET, D. BAKLOUTI, J.-P. BIBRING, R. BRUNETTO, M. ITO, I. FRANCHI, N. TOMIOKA, M. UESUGI, A. YAMAGUCHI, R. GREENWOOD, T. OKADA, T. USUI, T. YADA, K. HATAKEDA, K. YOGATA, D. LOIZEAU, T. LE PIVERT-JOLIVET, T. JIANG, J. CARTER, V. HAMM, M. ABE, A. ALÉON-TOPPANI, F. BORONDICS, Y. ENOKIDO, Y. HITOMI, N. IMAE, Y. KAROUJI, K. KUMAGAI, M. KIMURA, Y. LANGEVIN, C. LANTZ, M.-C. LIU, M. MAHLKE, A. MIYAZAKI, Z. MUGHAL, K. NAGASHIMA, A. NAKANO, A. NAKATA, A. NAKATO, M. NISHIMURA, T. OHIGASHI, T. OJIMA, F. POULET, L. RIU, N. SHIRAI, Y. SUGIYAMA, R. TAHARA, K. UESUGI, M. YASUTAKE, H. YUZAWA, A. MOUSSI-SOFFYS, S. NAKAZAWA, T. SAIKI, F. TERUI, M. YOSHIKAWA, S. TANAKA, S. WATANABE and Y. TSUDA, “Phosphorus-Rich Grains in Ryugu Samples with Major Biochemical Potential,” *Nat. Astron.* **8**, 1529–1535 (2024). DOI: 10.1038/s41550-024-02366-w

T. OHKOCHI, R. TAKAHASHI, H. FUJIWARA, H. TAKAHASHI, R. ADAM, U. PARLAK, K. YAMAMOTO, H. OSAWA, M. KOTSUGI, A. TSUKAMOTO, H. WADATI, A. SEKIYAMA, C. M. SCHNEIDER, M. TSUNODA, S. SUGA and T. KINOSHITA, “Investigation of Deterministic and Cumulative Nature in Helicity-Dependent Optical Switching of Ferrimagnetic Gd-Fe-Co Films,” *J. Magn. Magn. Mater.* **593**, 171854 (2024). DOI: 10.1016/j.jmmm.2024.171854

K. YAMAGAMI, H. UEDA, U. STAUB, Y. ZHANG, K. YAMAMOTO, S. H. PARK, S. KWON, A. MITSUDA, H. WADA, T. UOZUMI, K. MIMURA and H. WADATI, “ $4f$ Electron Temperature Driven Ultrafast Electron Localization,” *Phys. Rev. Res.* **6**(2), 023099 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.6.023099

P. MENCZEL, K. FUNO, M. CIRIO, N. LAMBERT and F. NORI, “Non-Hermitian Pseudomodes for Strongly Coupled Open Quantum Systems: Unravelings, Correlations, and Thermodynamics,” *Phys. Rev. Res.* **6**(3), 033237 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.6.033237

Y. C. HATAKAWA, R. KOBAYASHI, R. R. WATANABE, M. HARA, H. UENO and H. NOJI, “Engineering of IF₁-Susceptive Bacterial F₁-ATPase,” *Protein Sci.* **33**(4), e4942 (2024). DOI: 10.1002/pro.4942

G. BORNET, G. EMPERAUGER, C. CHEN, F. MACHADO, S. CHERN, L. LECLERC, B. GÉLY, Y. T. CHEW, D. BARREDO, T. LAHAYE, N. Y. YAO and A. BROWAEYS, “Enhancing a Many-Body Dipolar Rydberg Tweezer Array with Arbitrary Local Controls,” *Phys. Rev. Lett.* **132**(26), 263601 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevLett.132.263601

H. AKUTSU, M. URUICHI, S. IMAJO, K. KINDO, T. MASUTA, H. MANABE, Y. NAKAZAWA and S. S. TURNER, “Suppression of a Structural Phase Transition by an Orientational Disorder of Counteranions in an Organic Conductor, β'' - β'' -(BEDT-TTF)₂ClC₂H₄SO₃,” *Inorg. Chem.* **63**(36), 16872–16877 (2024). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.4c02735

H. ABE, S. MARUYAMA, H. KISHIMURA, M. URUICHI, D. OKUYAMA and H. SAGAYAMA, “Multiphase Coexistence in an Ionic Liquid: 1-Decyl-3-methylimidazolium Nitrate,” *J. Phys. Chem. Lett.* **15**(42), 10668–10676 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.4c02716

- T. YAMAMOTO, Y. NAKAMURA, T. NAITO, K. KONISHI, M. URUICHI, K. MATSUSHITA and Y. NAKAZAWA**, “Diverse Charge Distributions in the Triangular Lattice Superconductor κ -(ET)₂Cu[N(CN)₂]I: Infrared and Raman Spectroscopic Insights,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **93**(12), 124701 (10 pages) (2024). DOI: 10.7566/JPSJ.93.124701
- T. YAMAMOTO, T. FUJIMOTO, Y. NAKAZAWA, M. TAMURA, M. URUICHI, Y. IKEMOTO, T. MORIWAKI, H. CUI and R. KATO**, “Charge and Valence Bond Orders in the Spin-12 Triangular Antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **110**(20), 205126 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevB.110.205126
- F. HIRATA**, “Entropy Associated with Conformational and Solvent-Density Fluctuations in Biomolecular Solutions,” *J. Mol. Liq.* **409**, 125359 (2024). DOI: 10.1016/j.molliq.2024.125359
- S. HAYAMI, R. YAMBE and H. KUSUNOSE**, “Analysis of Photo-Induced Chirality and Magnetic Toroidal Moment Based on Floquet Formalism,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **93**(4), 043702 (4 pages) (2024). DOI: 10.7566/JPSJ.93.043702
- H. KUSUNOSE and J. KIKUCHI**, “Configuration Determination for Chiral and Polar Crystals by Anisotropic NMR Shift,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **93**(7), 074701 (11 pages) (2024). DOI: 10.7566/JPSJ.93.074701
- S. HAYAMI and H. KUSUNOSE**, “Unified Description of Electronic Orderings and Cross Correlations by Complete Multipole Representation,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **93**(7), 072001 (37 pages) (2024). DOI: 10.7566/JPSJ.93.072001
- L. LIAO, F. CHEN, J. PUEBLA, J. KISHINE, K. KONDOU, W. LUO, D. ZHAO, Y. ZHANG, Y. BA and Y. OTANI**, “Nonreciprocal Magnetoacoustic Waves with Out-of-Plane Phononic Angular Momenta,” *Sci. Adv.* **10**(28), eado2504 (2024). DOI: 10.1126/sciadv.ado2504
- A. A. TERESHCHENKO, VL. E. SINITSYN, I. G. BOSTREM, P. V. PRUDNIKOV, A. S. OVCHINNIKOV and J. KISHINE**, “Emergent Elasticity and Wavelike to Particle-Like Crossover in a Magnetic Chiral Soliton Lattice,” *Phys. Rev. B* **110**(14), 144426 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevB.110.144426
- S. SUMITA, A. TANAKA and Y. KATO**, “Anisotropy-Induced Spin Parity Effects,” *Phys. Rev. B* **110**(10), L100403 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevB.110.L100403
- A. DUTTA, C. TZSCHASCHEL, D. PRIYADARSHI, K. MIKUNI, T. SATOH, R. MONDAL and S. PAL**, “Evidence of Relativistic Field-Derivative Torque in Nonlinear THz Response of Magnetization Dynamics,” *Adv. Funct. Mater.* **35**(7), 2414582 (2025). DOI: 10.1002/adfm.202414582
- H. DAIMON and S. MATSUSHIMA**, “Cubic Coil System Composed of Three Sets of Cubic Triple Coils to Produce Wide Area 0.66% Uniform Magnetic Field in Any Direction,” *Rev. Sci. Instrum.* **95**(7), 074704 (2024). DOI: 10.1063/5.0185643