

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。2024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。

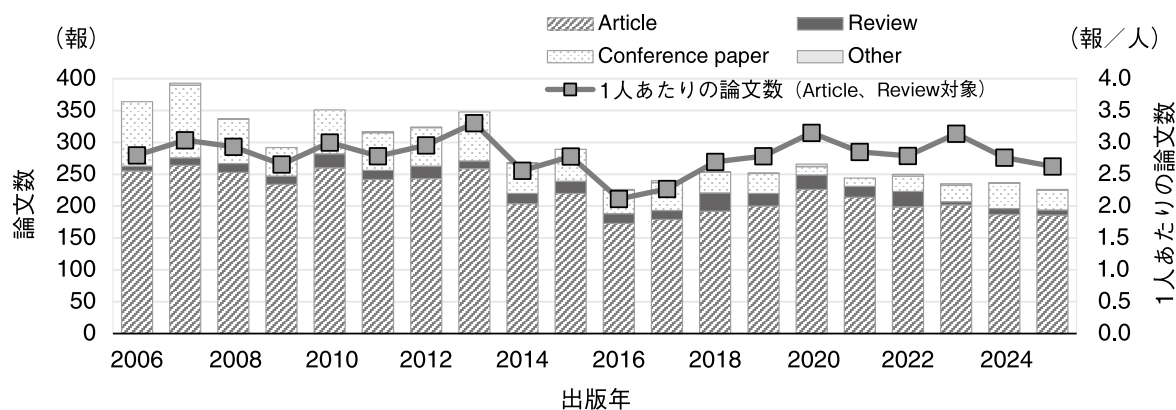
4-1 論文発表状況

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}
2006	255	8	101	0	94
2007	264	12	114	3	91
2008	252	14	69	1	91
2009	234	13	45	0	93
2010	260	22	69	0	94
2011	242	14	59	2	92
2012	243	20	60	1	89
2013	259	12	77	0	82
2014	204	16	47	1	86
2015	220	19	50	0	86
2016	173	15	37	1	89
2017	179	14	44	3	85
2018	192	29	32	1	82
2019	200	20	31	1	79
2020	226	23	13	4	79
2021	214	17	13	0	81
2022	199	24	24	3	80
2023	202	5	26	2	66
2024	187	9	40	1	71
2025	186	8	31	1	74

* 1 Scopus 調べ（2026 年 3 月 31 日現在）。

* 2 教授、准教授・助教授、主任研究員、特任講師、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、専任教授を公募し、最終候補者が決定し（2026年5月着任予定）、またセンター長業務の後任者への引き継ぎを行った。

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一部を継続して推進した。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。

繊細計測研究部門

岡本 裕巳（教授）（2000年11月1日～2026年3月31日）*）

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た。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。その成果を基礎として、蛍光分子とキラルな金属ナノ構造の組み合わせにより、高い円偏光度を示す蛍光が得られ、その起源をプラズモンモードとの関連において明らかにした。通常の遠方場の顕微鏡においても光学活性によるイメージングは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た。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た。また、それらの基盤的情報に基づき、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。更に、キラル金ナノ微粒子の光圧による輸送についても、円偏光の掌性による差があることを実証した。さらに、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った。

B-1) 学術論文

Y. XUAN, D. MIYAZAKI, Y. ISHIKAWA, H. OKAMOTO and M. SADGROVE, “Creation and Detection of Optical Spin in a Coupled Emitter–Plasmon System,” *Nano Lett.* **26(6)**, 2129–2135 (2026). DOI: 10.1021/acs.nanolett.5c05644

H.-T. SU, H. NIINOMI, A.-C. CHENG, Y. Y. TANAKA, K. SASAKI and T. SUGIYAMA, “Enantioselectivity Switch in Chiral Crystallization Using Optical Trapping with Gold Nanoparticles,” *Cell Rep. Phys. Sci.* **5(12)**, 102310 (2024). DOI: 10.1016/j.xcrp.2024.102310.

B-3) 総説, 著書

岡本裕巳, 山西絢介, マーク・サッドグローブ, 「キラル物質における円偏光による光圧」, *応用物理*, **95(3)**, 152–156 (2026).

岡本裕巳, 「ナノ構造物質のキラル光学効果」, *フォトニクスニュース*, **11(2)**, 56–60 (2025).

L. V. BESTEIRO, Y. LIU and H. OKAMOTO, “Chirality of Plasmonic Structures and Materials,” *J. Chem. Phys.* **161(18)**, 180401 (2024). DOI: 10.1063/5.0244919

B-4) 招待講演

岡本裕巳, 「キラル光学顕微イメージングと、キラル近接場–物質相互作用」, 第 73 回応用物理学会春季学術講演会 シンポジウム「光とキラリティー：その科学と応用」, 東京, 2026 年 3 月.

岡本裕巳, 「プラズモン物質のキラル光学効果, キラル近接場相互作用」, 第 29 回プラズモニク化学シンポジウム, 東京, 2025 年 12 月.

H. OKAMOTO, “Chiro-optical microscopy to observe chiral fields in micro-/nano-structured samples,” Structured Light and Materials Workshop 2025, Taipei (Taiwan), November 2025.

岡本裕巳, 「『ねじれた光』で見る左と右, 鏡写しの世界」, 第 144 回分子科学フォーラム, オンライン開催, 2025 年 11 月.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, H.-Y. AHN and J. YAMANISHI, “Chiro-optical microscopy and chiral near-field interaction between plasmon resonances and molecules,” PIERS2025 (Photonics and Electromagnetics Research Symposium) in Chiba, Chiba (Japan), November 2025.

J. YAMANISHI, H. OKAMOTO and H.-Y. AHN, “Optical Force Nanoscopy of Chiro-Optical Effects in Photoinduced Force Microscopy,” 33rd International Materials Research Congress (IMRC2025), Cancun (Mexico), August 2025.

J. YAMANISHI, H.-Y. AHN and H. OKAMOTO, “Optical Force Nanoscopy of Circular Dichroism in Photoinduced Force Microscopy,” 15th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META2025), Malaga (Spain), July 2025.

H. OKAMOTO, S. HASHIYADA, H.-Y. AHN and J. YAMANISHI, “Chiro-optical microscopy of plasmonic materials and chiral near-field interaction with molecules and materials,” 15th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META2025), Malaga (Spain), July 2025.

H.-Y. AHN, J. YAMANISHI and H. OKAMOTO, “Utilization of strong chiro-optical field near chiral and achiral plasmonic nanostructure: Chiral emission and photofabrication,” 15th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META2025), Malaga (Spain), July 2025.

H.-Y. AHN, J. YAMANISHI and H. OKAMOTO, “Plasmonic chiro-optical field for circularly polarized luminescence and chiral structure fabrication,” The 11th International Conference on Antennas and Electromagnetic Systems (AES2025), Tangier (Morocco), July 2025.

B-5) 特許出願

登録

EP4300059, “Circularly Polarized Light Illuminator, Analysis Device, and Microscope,” H. OKAMOTO and T. NARUSHIMA (National Institutes of Natural Sciences), 2022 年. (登録日 2025 年 5 月 21 日)

40106088, “Circularly Polarized Light Illuminator, Analysis Device, and Microscope,” H. OKAMOTO and T. NARUSHIMA (National Institutes of Natural Sciences), 2022 年. (登録日 2025 年 9 月 5 日)

特許第 7749245 号, 「円偏光照射器, 分析装置及び顕微鏡」, 岡本 裕巳, 成島 哲也 (自然科学研究機構), 2022 年. (登録日 2025 年 9 月 26 日)

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

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),

「アト秒ビームライン II (高繰り返し型) と計測」分科会委員 (2025–2026).

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-10) 競争的資金

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), 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用い、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、成果が得られるようになった。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た。円二色性顕微鏡に更に新たなアイデアを導入して、汎用性の高い、ロバストな装置とする開発は継続しており、共同研究者が今後も展開する予定である。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が持たれ、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・輸送に関する新たな成果が得られ、今後その展開にも期待したい。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、その成果の取りまとめを行う予定としている。

*) 2026 年 3 月 31 日定年退職

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）

LEE, Lu-Hsin（大学院生）

福富 実（大学院生）

鎌田 一輝（特別共同利用研究員）

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); *Science Advances* **11**, eadv9584 (2025)]。

B-1) 学術論文

K. KIM, L. HOU, M. ABE and T. KUMAGAI, “Real-Space Observation of Metal–Insulator Transition of Individual Anisotropic Nanodomain in VO₂/TiO₂(110) Thin Films,” *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **23(3)**, 262–269 (2025). DOI: 10.1380/ejssnt.2025-035

J. NISHIDA, K. OTSUKA, T. MINATO, Y. K. KATO and T. KUMAGAI, “Ultrafast Infrared Nano-Imaging of Local Electron–Hole Dynamics in CVD-Grown Single-Walled Carbon Nanotubes,” *Sci. Adv.* **11(25)**, eadv9584 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.adv9584

A. SHIOTARI, J. NISHIDA, A. HAMMUD, F. SCHULZ, M. WOLF, T. KUMAGAI and M. MÜLLER, “Scattering Near-Field Optical Microscopy at 1-nm Resolution Using Ultralow Tip Oscillation Amplitudes,” *Sci. Adv.* **11(24)**, eadu1415 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.adu1415

A. SHIOTARI, S. LIU, G. TRENINS, T. SUGIMOTO, M. WOLF, M. ROSSI and T. KUMAGAI, “Picocavity-Enhanced Raman Spectroscopy of Physisorbed H₂ and D₂ Molecules,” *Phys. Rev. Lett.* **134(20)**, 206901 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevLett.134.206901

X. ZHANG, R. MATSUO, Y. YAHANO, J. NISHIDA, K. NAMURA and M. SUZUKI, “Configurable Vibrational Coupling in Laser-Induced Microsecond Oscillations of Multi-Microbubble System,” *Small* **21(20)**, 2408979 (2025). DOI: 10.1002/smll.202408979

B-3) 総説, 著書

T. KUMAGAI, K. MIWA and B. CIRERA, “Point-Contact Tip-Enhanced Raman Spectroscopy: Picoscale Light–Matter Interactions within Plasmonic Cavities,” *Nano Lett.* **25(43)**, 15449–15459 (2025). DOI: 10.1021/acs.nanolett.5c04045

J. NISHIDA, “Infrared Nano-Spectroscopy and Imaging on Spatially Confined Nanomaterials,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **64(4)**, 040802 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/adc26e

B-4) 招待講演

熊谷 崇, 「ピコスケールのラマン分光」, 先端光科学研究の新展開, 愛知, 2026年3月.

熊谷 崇, 「Frontiers in Surface Science Opened by Advanced Nanometrology」, 現代表面科学の到達点とフロンティアを超えて, 千葉, 2026年2月.

西田 純, 「超高速赤外散乱ナノイメージングによる低次元半導体局所ダイナミクスの解明」, 表面・光融合先端計測研究会 SPARC, 岡崎, 2025年12月.

西田 純, 「単一タンパク質の赤外ナノ分光」, VUV-SX 領域の光科学による生命科学, 岡崎, 2025年10月.

熊谷 崇, 「探針増強近接場分光の最前線 単一原子・単一分子・ナノマテリアルの精密分光」, R7年度第1回合成横断技術領域ワークショップ, 東京, 2025年7月.

T. KUMAGAI, “Point-Contact Tip-Enhanced Raman Spectroscopy: Picoscale Light–Matter Interactions within Plasmonic Cavities,” AVS Taiwan Chapter Symposium, Chiayi (Taiwan), January 2026.

J. NISHIDA, “Application of ultrafast infrared nano-imaging to low-dimensional materials,” The Physical Society of Japan 2025 Annual Meeting, Hiroshima (Japan), September 2025.

T. KUMAGAI, “Ultrafast Nano-Spectroscopy of Photo-Induced Dynamics in Low-Dimensional Materials,” The 2nd Sino-German Workshop on Surface Science of Complex Systems, Changchun (China), September 2025.

J. NISHIDA, “Ultrafast mid-infrared nano-imaging of local electron–hole dynamics in low-dimensional materials,” SPIE Optics + Photonics, San Diego (USA), August 2025.

T. KUMAGAI, “Ultrafast Nano-Spectroscopy of Photo-Induced Dynamics in Low-Dimensional Materials,” The 82nd Okazaki Conference “Recent Advances and Perspectives of Interfacial Materials and Molecular Sciences lead by Next-Generation Laser Techniques and Computational Science,” Okazaki, Aichi (Japan), July 2025.

T. KUMAGAI, “Toward Atomic-Scale Scattering-Type Scanning Near-Field Optical Microscopy,” STM’25, Seoul (Korea), June 2025.

T. KUMAGAI, “Atomic-Scale Phonon Studies Using Tip-Enhanced Near-Field Optical Spectroscopy,” The 22nd International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS 2025), The 77th Yamada Conference, Shiga (Japan), May 2025.

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–).

理科教育活動

「科学三昧 in あいち 2025」指導助言 (2025).

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–2026年3月.

大阪大学大学院基礎工学研究科, 招へい教員, 2025年4月–2026年3月.

東京大学大学院理学系研究科, 非常勤講師, 2025年4月–2025年9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).

科研費学術変革領域研究(B), 「スマートナノ粒子プラズモン共鳴スペクトルの一粒子計測」, 西田 純 (2025年度–2027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。

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、加藤教授、飯野教授、岡本准教授）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。

2025 年度の特筆すべき研究成果として、シアノバクテリア概日時計システムの進化に関する共同研究（秋山グループ）が科学雑誌「*Nature Communications*」誌に掲載された。その他、機能分子システム創成研究部門からは、キラル有機超伝導体における頑健なスピン運動量結合に関する研究成果が「*Physical Review Research*」誌に（山本グループ）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だ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）
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）
杉坂 かな恵（技術支援員）
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.* *Nature Commun.* 2025; Furuike *et al.* *PNAS Nexus* 2025; 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.*, *Nature Commun.* 2025）。約 31 億年前，約 26 億年前，約 22 億年前，約 13 億年前，約 1 億年前の時計タンパク質を復元し，それぞれが体内時計の特徴であるリズム反応を示すかどうかを検証した。その結果，約 22 億年前の時計タンパク質が，歴史上で時を刻み始めた最初の体内時計であったことを解明した。本成果は，テレビ報道（知り TIME：2025 年 6 月 5 日），新聞報道（読売新聞：2025 年 6 月 2 日），オンラインニュース（20 件以上）等で取り上げられ，広く一般社会の注目を集めることとなった。
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.*, *PNAS Nexus* 2025）。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。本成果は、オンラインニュース（約10件）等での取り上げられた。

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のが、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）等での取り上げられ、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-1) 学術論文

C. YAMAGUCHI, R. A. KANALY, E. NISHIZAKI, K. YAMASHITA, K. TAKATSUKI, Y. FURUIKE, M. FANG, S. AKIYAMA, S. AOKI, M. TSUKAMOTO, Y. NAKAHIRA, S. GOLDEN and S. KUTSUNA, “Effects of the Signaling Molecule Cyclic-di-GMP on Cyanobacterial Circadian Rhythm in *Synechococcus elongatus* PCC 7942,” *J. Bacteriol.* e00574-25 (2026). DOI: 10.1128/jb.00574-25

K. ITO-MIWA, Y. ONOUE, T. KONDO and K. TERAUCHI, “Effect of pH on the Cyanobacterial Circadian Oscillator In Vitro,” *Commun. Biol.* **8**(1), 828 (2025). DOI: 10.1038/s42003-025-08273-8

A. MUKAIYAMA, Y. FURUIKE, K. ITO-MIWA, Y. ONOUE, K. HORIUCHI, K. KONDO, E. YAMASHITA and S. AKIYAMA, “Evolutionary Origins of Self-Sustained Kai Protein Circadian Oscillators in Cyanobacteria,” *Nat. Commun.* **16**(1), 4541 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-59908-7

Y. FURUIKE, Y. ONOUE, S. SAITO, T. MORI and S. AKIYAMA, “The Priming Phosphorylation of KaiC Is Activated by the Release of Its Autokinase Autoinhibition,” *PNAS Nexus* **4**(5), pgaf136 (2025). DOI: 10.1093/pnasnexus/pgaf136

B-3) 総説, 著書

S. AKIYAMA and Y. FURUIKE, “Autonomous Disassembly of Circadian Clock System of Cyanobacteria at Dawn,” in *Circadian Clocks in 2024*, 89–97 (2025).

B-4) 招待講演

秋山修志, 「最古の体内時計が日の出を知らせた約 22 億年前のある日」, 自然科学研究機構シンポジウム「元素から紐解く宇宙と生命のものがたり」, 岡崎市 (ハイブリッド開催), 2026 年 3 月.

秋山修志, 「分子科学研究所の X 線溶液散乱装置とその利用事例の紹介」, 第 3 回 ARIM マテリアル循環－量子・電子制御領域合同計測セミナー, オンライン開催, 2026 年 3 月.

古池美彦, 「古代地球における時計タンパク質 KaiC の構造の進化」, 学術変革領域(A) 「時間タンパク質学」領域会議, 福井, 2026 年 1 月.

古池美彦, 「Structural Evolution of Clock Protein KaiC on Ancient Earth」, 日本生物物理学会 シンポジウム「ノルウェー・日本二国間シンポジウム」, 奈良, 2025 年 9 月.

古池美彦, 「古代 KaiC の構造に刻まれた 概日リズムの起源」, 日本蛋白質科学会年会 シンポジウム「時間タンパク質学: 時を生み出すタンパク質分子とその実体」, 姫路, 2025 年 6 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」, 学術変革領域(A) 「時間タンパク質学」第三回領域会議, 東京, 2025 年 4 月.

Y. FURUIKE, “Crystallizing Clock Protein KaiC with Planetary Rhythm Across Billions of Years,” 国立成功大学生物化学及分子生物学研究所セミナー, Tainan (Taiwan), November 2025.

S. AKIYAMA, “One day about 2.2 billion years ago, cyanobacteria anticipated the timing of the next sunrise,” 20th Asian Chemical Congress, Bangkok (Thailand), June 2025.

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 (2023–2026).

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 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, 客員教授(客員研究員), 2025年7月–2026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」, 2025年11月. (古池美彦)

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」(代表者: 秋山修志), 古池美彦(研究分担者) (2022年度–2026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–2025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).

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).

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).

C) 研究活動の課題と展望

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（教授（兼任*））（2025 年 4 月 1 日～2026 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）

*大阪大学大学院基礎工学研究科

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) 新規極短パルス光源の開発
- 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) コヒーレント多次元分光法は，凝縮系における超高速ダイナミクスを解明するための強力な手法である。なかでも二次元電子分光法は，不均一広がりを有する系のダイナミクスや，複数の発色団を含む分子系におけるエネルギー移動過程を詳細に追跡できるため，線形分光法や従来の過渡吸収分光法では得ることのできない相関情報を与える。一方で，従来の測定装置では観測可能な周波数帯域が限られており，広い周波数領域にわたる分子応答間の相関を，高い時間分解能で測定することは容易ではなかった。そこで我々は，音響光学素子に基づく高速パルス整形器を導入し，超広帯域コヒーレント多次元分光の基盤となるパルス整形技術の開発に取り組んだ。遅延時間掃引，位相反転，回転座標系における遅延時間掃引など，多次元分光の実現に不可欠な波形整形・位相変調技術の開発と実装を進め，これにより，広帯域かつ高時間分解能で分子の電子・振動応答の相関を計測するための実験基盤を構築した。
- b) 凝縮相における単純分子系の励起状態ダイナミクスや，DNA・タンパク質の紫外光応答を解明するうえで，紫外極短パルス光は重要なツールである。しかし，分散補償の困難から，空気中での発生はこれまで十分に開拓されてこなかった。本研究では，アクロマティック第二高調波発生によって発生させた紫外広帯域パルスを，Two-Dimensional Spectral Shearing Interferometry (2DSI) による群遅延評価を指標としてフーリエ限界まで圧縮する新規光学系を開発した。光線追跡シミュレーションに基づき，広帯域紫外パルスに含まれる大きな高次分散をプリズム対，および可変形鏡をフーリエ面に配置した 4-f パルス整形器を用いて補償し，スペクトル全域にわたって群遅延をほぼゼロに制御することに成功した。これにより，深紫外および近紫外領域において，フーリエ限界に迫る時間幅 ~ 3 fs の極短パルス光発生を実現し，凝縮相における高時間分解能紫外分光計測への足がかりを得た。
- c) 極短パルスを用いた時間分解分光では，電子基底状態および励起状態に誘起された核波束運動を観測することが可能であり，両状態のダイナミクスに関する有益な知見が得られる。最近我々は，光合成アンテナ複合体 Lhcp を対象として，サブ 10 fs の時間分解能を有する過渡吸収分光測定を行った。その結果，クロロフィルを選択的に励起した条件においても，カロテノイドの振動コヒーレンスが観測され，クロロフィルとカルボニルカロテノイドの間に弱い励起子の混成が存在することを示唆する知見が得られた。これらの結果は，カロテノイドが単なる補助色素ではなく，

集団的な励起状態の形成に寄与することを示しており、天然および人工の集光アンテナ系におけるコヒーレンスの解釈に新たな視点を与えるものである。

B-1) 学術論文

- Y. YONEDA, M. KOSUGI, J. MINAGAWA and H. KURAMOCHI**, “Upper-State-Assisted Uphill Energy Transfer in a Far-Red Light-Harvesting Antenna from an Antarctic Alga,” *J. Chem. Phys.* **164**(8), 085101 (2026). DOI: 10.1063/5.0310823
- L. LIU, H. KURAMOCHI, M. IWAMURA, K. NOZAKI and T. TAHARA**, “Localization of the Au–Au Bond Strength in the Triplet Excited State of the $[\text{Au}(\text{CN})_2]^-$ Oligomers Revealed by Ultrafast Time-Domain Raman Spectroscopy,” *Chem. Sci.* **17**(5), 2676–2684 (2026). DOI: 10.1039/D5SC05664K
- R. MATSUOKA, Y. YONEDA, H. KURAMOCHI, T. MIURA, T. IKOMA, M. SAIGO, T. EHARA, K. MIYATA, K. ONDA and T. KUSAMOTO**, “Spectroscopic Characterization of the Charge-Separated Zwitterionic State Responsible for the Excimer-Like Emission of a Luminescent Diradical,” *J. Am. Chem. Soc.* **148**(1), 1086–1095 (2026). DOI: 10.1021/jacs.5c17112
- K. HIRAMATSU, H. KURAMOCHI, S. TAKEUCHI and T. TAHARA**, “Time-Domain Raman Optical Activity Spectroscopy,” *Optica* **12**(12), 1981–1987 (2025). DOI: 10.1364/OPTICA.575503
- M. KOGA, D. H. KANG, Z. N. HEIM, N. HALDAR and D. M. NEUMARK**, “Extreme Ultraviolet Time-Resolved Photoelectron Spectrometer with an Ultrathin Liquid Flat Jet,” *Rev. Sci. Instrum.* **96**(7), 073002 (2025). DOI: 10.1063/5.0272226
- T. EHARA, Y. YONEDA, T. YOSHIDA, T. OGAWA, Y. KONISHI, T. ONO, A. MURANAKA, H. KURAMOCHI, K. MIYATA and K. ONDA**, “Dynamic Excited-State Localization Induced by Jahn-Teller Distortion Observed by Coherent Vibrational Spectroscopy,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(30), 26446–26455 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c06020
- S. TAHARA, R. KURIHARA, K. KOJIMA, H. KURAMOCHI, S. TAKEUCHI, Y. SUDO and T. TAHARA**, “Ultrafast Protein Dynamics Prior to Retinal Photoisomerization in Microbial Rhodopsins,” *J. Phys. Chem. Lett.* **16**(23), 5732–5738 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpclett.5c00623
- Y. YONEDA, T. KONISHI, K. SUGA, S. SAITO and H. KURAMOCHI**, “Excited-State Aromatization Drives Nonequilibrium Planarization Dynamics,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(14), 12051–12060 (2025). DOI: 10.1021/jacs.4c18623

B-3) 総説, 著書

米田勇祐, 「フェムト秒二次元分光による光化学反応の分析」, *ぶんせき*, **7**, 187 (2025).

B-4) 招待講演

- 倉持 光, 「先端的超高速・非線形分光で迫る凝縮相分子ダイナミクス」, 第46回光化学若手の会, 札幌, 2025年6月.
- Y. YONEDA and H. KURAMOCHI**, “Unraveling Ultrafast Chemical Reaction Dynamics of Condensed-Phase Complex Molecules through Vibrational Coherence,” The 22nd International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS2025), Shiga (Japan), May 2025.
- H. KURAMOCHI**, “Visualizing excitonic and primary structural dynamics in photoactive proteins by ultrafast coherent vibrational spectroscopy,” Telluride meeting “Protein dynamics,” Telluride (USA), July 2025.

H. KURAMOCHI, “Mapping ultrafast chemical reaction dynamics in complex molecular systems via vibrational coherence,” Kobe Seminar on Quantum Biology and Technology, Kobe (Japan), October 2025.

Y. YONEDA and H. KURAMOCHI, “Unraveling ultrafast chemical reaction dynamics of condensed-phase complex molecules using few-cycle pulses,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), “Ultrafast Chemical Dynamics,” Honolulu, Hawaii (USA), December 2025.

Y. YONEDA and H. KURAMOCHI, “Mapping ultrafast chemical reaction dynamics through vibrational coherence,” Pacifichem 2025, “Recent Advances in Coherent Multidimensional Spectroscopy,” Honolulu, Hawaii (USA), December 2025.

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).

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.

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な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).

科研費学術変革領域研究(A) (公募班), 「新規超高速多次元分光による光応答性タンパク質の不均一性と反応初期過程の統合的理解」, 倉持 光 (2025 年度–2026 年度).

科研費基盤研究(S), 「新奇分子研究が切り拓くロドプシン科学のフロンティア」 (代表者: 井上圭一), 倉持 光 (研究分担者) (2025 年度–2029 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, 凝縮相における複雑分子系の機能・構造・ダイナミクスの解明に取り組んでいる。特に分子研においては, 極短パルス光を用いた独自の超高速コヒーレント振動分光の材料系への応用を進めるとともに, その多次元振動分光への発展や, 新規方法論開発を支える極短パルス光源の開発に取り組んできた。さらに, 従来のアンサンブル測定では捉えられない自発的揺らぎが, 巨大生体分子の電子状態, 構造, 反応ダイナミクスにどのような影響を及ぼすかを明らかにするため, 単一分子計測に基づく新しい蛍光相関分光法の開発も進めてきた。これらの研究はなお端緒にあるものの, 今後はその応用をさらに展開し, 凝縮相ダイナミクス研究に新たな研究潮流を切り拓きたい。

岡本 泰典（准教授）（2024 年 8 月 1 日着任）

岡本 早紀（技術支援員）

江藤 智子（技術支援員）

川口 律子（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) 生体内での自律構築に向けた人工多核金属酵素の開発
- c) 細胞外膜小胞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：連鎖的に結びついた生体内の化学反応ネットワークを通じて，細胞機能は制御されている。この生体内における化学反応ネットワークを再設計し，物質生産や医薬分野への応用を目指す研究が精力的に展開されている。生体内の化学反応ネットワークへ非天然の化学反応を自在に組み込むことができれば，天然の酵素反応のみではアクセスが困難な高付加価値化合物の生産，さらには新たな作用機序に基づく医薬の開発へとつながる。こうした背景を踏まえ，我々は非天然の物質変換能を備えた人工金属酵素を活用し，生体内の化学反応ネットワークへの介入をめざしている。

人工金属酵素は，①ホストとなるタンパク質が有する内部空間へ非天然の合成金属錯体を導入する方法，あるいは②非天然の金属中心をタンパク質のアミノ酸側鎖によって構築する方法で得ることができる。人工金属酵素研究においては，酵素が有する「温和な反応条件下での高選択的な物質変換能」と，金属錯体の持つ「自然界には存在しない強力な化学変換能」の双方を有する触媒が開発がされてきた。加えて，我々は人工金属酵素が示す「生体分子寛容性」にも注目してきた。生体分子寛容性とは，他の生体分子（タンパク質や酵素など）が共存する環境下においても，人工金属酵素の非天然機能が失活しないことを指す。この特性を活かし，我々のグループでは人工金属酵素を通じた生体内化学反応ネットワークの再編成と制御に取り組んでいる。この目標の実現へ向け，以下の3つのプロジェクトを並行して推進している。

- a) 光駆動型人工金属酵素の開発と応用；これまでに数多くの人工金属酵素が開発されてきたものの，外部刺激を介して触媒活性の制御が可能なものはほとんど報告されていない。我々は細胞内や生体内での活用を視野に入れ，光を用いた活性制御が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へルテニウム錯体を導入することで，その光化学特性を変化させることに成功した。ここで得られた人工金属酵素は光照射によって活性化し，抗体におけるアミノ酸残基選択的な化学修飾反応を触媒する能力を持つ。現在は，金属錯体の選定ならびにホストタンパク質の改変の両面から，この光駆動型人工金属酵素のさらなる高機能化を進めている。さまざまな条件検討の結果，これまでに利用してきたホストタンパク質の大腸菌による発現系の構築が難しいことが判明した。そこで来年度は，*in vitro* 翻訳系の利用など他のタンパク質発現系を検討し，ホストタンパク質への変異導入をねらう。また，計算機科学的手法と併用し，新しいホストタンパク質候補の探索を行っていく。
- b) 人工多核金属酵素の開発；複数の金属イオンから活性中心を構築する多核金属酵素は，合成化学的に難度の高い物

質変換を低環境負荷型の条件下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再構築することにより、強力な触媒開発に資する設計指針を得ることが可能となる。しかしながら、タンパク質の内部で複数の金属イオンを設計通りに配置することは極めて困難である。こうした背景のもと、我々は独自に開発した計算科学的設計手法を駆使して、多核金属中心の構築に取り組んでいる。

- c) 細胞外膜小胞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への展開を念頭に、我々は生物の産生するベシクルのエンジニアリング基盤の確立に取り組んでいる。具体的には、このベシクル内部に複数種類の機能性生体分子を導入するための手法の開発に取り組んでいる。現在までに、ベシクル内外に2つの異なるタンパク質を同時に導入可能であることを示している。

以下では、特に進捗の見られた「b) 人工多核金属酵素の開発」についての成果を記載する。

生体内の化学反応ネットワークへの介入という長期目標の達成に向け、生体内の情報伝達を担っているサイトカインの人工酵素化の研究を進めている。具体的には、サイトカインの一種であるマクロファージ遊走阻止因子（MIF）の内部空間に非天然の多核金属中心を設計した。構築する多核金属中心としては、合成配位子での構築事例のある亜鉛三核錯体をターゲット構造として選定した。まず、独自に立案した計算プログラムを用いた幾何学的な配置探索により、三核亜鉛中心を構築可能な部位の候補を網羅的に割り出した。次に、密度汎関数理論（DFT）計算により、最適な部位を絞り込んだ。得られた設計を基に、実際に MIF 変異体を作製し、亜鉛イオンと混合したところ、X線結晶構造解析により、設計通りに三核亜鉛中心が形成されていることが確認された。設計構造と結晶構造の RMSD は 0.8 Å 以下であり、我々の設計手法の精度の高さを示すことができた。MIF は元来加水分解活性を示さないが、この三核亜鉛中心が形成された MIF、すなわち人工多核亜鉛酵素は外来性功能として高い加水分解活性を発現した。この活性は既報の人工酵素と比較してもトップクラスの値であった。

B-1) 学術論文

A. UENO, F. TAKIDA, T. KITA, T. ISHII, T. HIMIYAMA, T. MABUCHI and Y. OKAMOTO, “A Cytokine-Based Designer Enzyme with an Abiological Multinuclear Metal Center Exhibits Intrinsic and Extrinsic Catalysis,” *Nat. Commun.* **16(1)**, 6781 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-61909-5

B-4) 招待講演

岡本泰典, 「タンパク質で金属錯体を合成する。タンパク質で金属錯体の機能を操る」, 錯体化学若手の会九州・沖縄支部勉強会, 福岡, 2025 年 12 月.

Y. OKAMOTO, “Rational Design of a Synthetic Trinuclear Zinc Center in a Protein Scaffold: Combining Non-native Catalysis with Native Protein Activity,” 21st International Conference on Biological Inorganic Chemistry, Long Beach, California (USA), August 2025.

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–), 広報・ホームページ委員 (2025–).

金属の関与する生体関連反応シンポジウム評議委員 (2025–).

理科教育活動

30周年記念式典挨拶「岐阜サマー・サイエンス・スクール」中津川市教育委員会 (2025).

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: 分子デザインはじめました, URL: <https://t.co/aqYGgPTpK6>, 2024年3月31日配信開始, 2026年3月現在で23エピソード) (2025).

B-8) 大学での講義, 客員

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), 2025年4月–2026年3月.

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構さきかけ研究(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).

科研費基盤研究(B), 「光駆動型タンパク質化学修飾酵素の創成」, 岡本泰典 (2025年度–2028年度).

C) 研究活動の課題と展望

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個別の研究課題として上記の3つの研究を進めている。

今後の展望として, この3つのプロジェクトを並行して進めていくが, その中でも, 長期目標の達成に向けて中核となる人工多核金属酵素の研究に力点を置く。元来有していない新しい機能をMIFに付与することについては上述のように成功している。これを受け, 次なる課題としては①MIF元来の機能が維持されているかの検証, ②変異導入による触媒機能の向上, ③多核金属中心のレパートリーの拡張が挙げられる。来年度は主に①と②に注力して研究を進める。

小杉 貴洋（助教）（2015 年 6 月 1 日～2026 年 2 月 28 日）＊）

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。我々は，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に成功した。さらに，その酵素の変性温度は 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，2025 年度に *Protein Science* 誌に論文を出版した。現在は，更なる活性向上を目指しつつ，酵素活性に重要な要素は何か明らかにする研究を続けている。
- 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。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 複合体の構成タンパク質の組み合わせを合理的に変え，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。現在は，V-ATPase や TOR 複合体を合理的に改造することで，理解するだけでなく，細胞の制御を目指す研究を行っている。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) 構造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-1) 学術論文

T. KOSUGI, M. TANABE and N. KOGA, “De Novo Design of ATPase Based on a Blueprint Optimized for Harboring the P-Loop Motif,” *Protein Sci.* **34(6)**, e70132 (2025). DOI: 10.1002/pro.70132

B-3) 総説、著書

小杉貴洋,「タンパク質複合体の合理的改造」, *生体の科学*, **76(2)**, 131–135 (2025).

B-4) 招待講演

小杉貴洋,「計算科学による機能的人工蛋白質の設計」, 日本化学会第 106 春季年会, 船橋, 2026 年 3 月.

小杉貴洋,「タンパク質デザインによる機能の設計とその応用」, 発酵と代謝研究会第 2 回勉強会「次世代型の新規タンパク質設計と培養制御」, 東京, 2025 年 12 月.

小杉貴洋,「創ることと理解することと〜どのように生体分子を設計し何を指すのか?〜」, 分子研研究会「2050 年の生体分子科学を語る」, 岡崎, 2025 年 10 月.

小杉貴洋,「データと計算でタンパク質をデザインする」, 未来工学セミナー, 相模原, 2025 年 6 月.

小杉貴洋,「タンパク質デザインの現状と未来について考える」, 未来物質開拓セミナー, 相模原, 2025 年 6 月.

小杉貴洋,「計算によりタンパク質をデザインする?」, 第 478 回生物科学セミナー, 岡山, 2025 年 5 月.

T. KOSUGI, “Toward Rational Control of Concerted Protein Functions through Computational Protein Design,” The 12th Asian Biophysics Association (ABA) Symposium, Hong Kong (China), January 2026.

T. KOSUGI, “Control of protein complexes through computational protein design methods,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), “Polypeptide Folding and Assembly for the Materials Design and Therapeutic Applications,” Honolulu (USA), December 2025.

T. KOSUGI, “Toward rational control of cellular functions through customization of concerted protein functions,” SMART Symposium: 2025 Frontier in Computational Chemistry, Biophysics, and Biological Sciences, Shenzhen (China), October 2025.

T. KOSUGI, “Nature-inspired Computational Design Strategy for Rational Control of Protein Complexes,” 第27回iCeMS国際シンポジウム「Self-Assembly Science for Unlocking Life’s Secrets」, Kyoto, October 2025.

T. KOSUGI, “Protein Design: From Structure to Function—Unlocking Future Applications,” Tsukuba Conference 2025, Tsukuba, October 2025.

T. KOSUGI, “Control of concerted functions exerted by protein complexes using computational protein design,” Korea-Japan International Symposium on Protein Science, Himeji (Japan), June 2025.

T. KOSUGI, “Computational Protein Structure Prediction and Design,” UK-Japan FoS, London (UK), June 2025.

T. KOSUGI, “Control of concerted protein functions using computational protein design,” Protein Science and Engineering in the New Era, Taipei (Taiwan), April 2025.

T. KOSUGI, “Toward controlling energy conversion and signaling proteins using computational protein design,” IPR Seminar 2025 (International), Functions, structures and dynamics of energy conversion and signaling proteins—The latest research and future works from early and mid-career scientists—, Suita (Japan), April 2025.

B-6) 受賞, 表彰

小杉貴洋, 第 26 回酵素応用シンポジウム研究奨励賞 (2025).

小杉貴洋, 分子科学研究奨励森野基金 (2025).

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) (2025–2026).

学会の組織委員等

第 63 回日本生物物理学会年会ミニシンポジウム「タンパク質デザインへの誘い」オーガナイザー (2025).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構研究開発領域に関する情報提供 (2025).

学会誌編集委員

生物物理学会誌編集委員 (2025–2026).

日本蛋白質科学会 蛋白質科学会アーカイブ編集委員 (2025–).

B-8) 大学での講義, 客員

近畿大学薬学研究科, 非常勤講師, 「大学院特別講義」, 2025 年 5 月.

総合研究大学院大学先端学術院, 「構造生体分子科学」, 2025 年 12 月.

B-10) 競争的資金

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).

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–2025 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).

(公財) 旭硝子財団化学・生命分野研究奨励, 「タンパク質デザインと細胞生物学の融合による細胞内タンパク質機能の理解」, 小杉貴洋 (2025 年度–2026 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).

*) 2026 年 3 月 1 日金沢大学医薬保健研究域准教授

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）

鍋井 庸次（助教）

WU, Dongfang（特任研究員）

戸川 欣彦（特別訪問教授）

岸根 順一郎（特別訪問教授）

佐藤 琢哉（特別訪問教授）

加藤 雄介（特別訪問教授）

PERNADI, Niza Lian（インターンシップ）

後藤 拓（大学院生）

竹脇 由佳（大学院生）

楠本 恵子（大学院生）

原多 己暢（特別共同利用研究員）

鈴木 ひかり（特別共同利用研究員）

村田 了介（技術支援員）

石川 裕子（事務支援員）

深田 亮平（特命専門員（ERATO））

坂本 昌代（事務支援員（ERATO））

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、その電氣的磁氣的特性を測定した。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

B. CHEN, K. HASHIMOTO, M. KIMATA, T. SASAKI, S. SEKI, H. M. YAMAMOTO and M. SUDA, “Manipulating Quantum Criticality in Light-Induced 2D Superconductivity,” *Commun. Mater.* **7**(1), 32 (2026). DOI: 10.1038/s43246-025-01014-8

Y. NABEI, C. YANG, H. SUN, H. JONES, T. MAI, T. WANG, R. BODIN, B. PANDEY, Z. WANG, Y. XIONG, A. H. COMSTOCK, B. EWING, J. BINGEN, R. SUN, D. SMIRNOV, W. ZHANG, A. HOFFMANN, R. RAO, M. HU, Z. V. VARDENY, B. YAN, X. LI, J. ZHOU, J. LIU and D. SUN, “Orbital Seebeck Effect Induced by Chiral Phonons,” *Nat. Phys.* **22**, 245–251 (2026). DOI: 10.1038/s41567-025-03134-x

S. MIWA, T. YAMAMOTO, T. NAGATA, S. SAKAMOTO, K. KIMURA, M. SHIGA, W. GAO, H. M. YAMAMOTO, K. INOUE, T. TAKENOBU, T. NOZAKI and T. OHTO, “Spin Polarization Driven by Molecular Vibrations Leads to Enantioselectivity in Chiral Molecules,” *Sci. Adv.* **11**(44), eadv5220 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.adv5220

R. SUN, Y. NABEI, A. MCCONNELL, X. ZHANG, A. COMSTOCK, H. JONES, R. GYAWALI, Y. XIONG, Z. WANG, J. LIU, W. ZHANG and D. SUN, “Determination of Orbital Relaxation in Ti/Ni Heterostructure *via* Orbital Pumping,” *J. Appl. Phys.* **138**(12), 123905 (2025). DOI: 10.1063/5.0292745

Z. XU, S. SAIEV, P. QIAN, Y. NABEI, Z. WANG, J. M. RINEHART, A. M. ÖSTERHOLM, A. L. JONES, J. H. LEE, C. HWANG, S. WANG, R. SUN, D. SHIN, S. JEON, K. E. ELANGOVA, J. VURA-WEIS, V. COROPCEANU, J. RODRÍGUEZ-LÓPEZ, J. R. REYNOLDS, D. SUN, J. L. BRÉDAS and Y. DIAO, “Supramolecular Chirality Largely Modulates Chemical Doping of Conjugated Polymers,” *Nat. Commun.* **16**(1), 8381 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-62915-3

R. GHANBARI, K. P. HARIKRISHNAN, K. PATEL, H. ZHOU, T. ZHOU, R. LIU, L. WU, A. KHANDELWAL, K. J. CRUST, S. HAZRA, J. CARROLL, C. J. G. MEYERS, J. WANG, S. PROSANDEEV, H. QIAO, Y. H. KIM, Y. NABEI, M. CHI, D. SUN, N. BALKE, M. HOLT, V. GOPALAN, J. E. SPANIER, D. A. MULLER, L. BELLAICHE, H. Y. HWANG and R. XU, “Strain-Induced Lead-Free Morphotropic Phase Boundary,” *Nat. Commun.* **16**(1), 7766 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-63041-w

F. POP, N. MROWEH, P. AUBAN-SENZIER, G. L. J. A. RIKKEN, D. HIROBE, H. M. YAMAMOTO, A. FRĄCKOWIAK, I. OLEJNICZAK, S. PILLET, E. E. BENDEIF, P. ALEMANY, E. CANADELL and N. AVARVARI, “Chiral Metallic DM-EDT-TTF Radical Cation Salts: Anion Size-Dependent Structural and Electronic Transitions, Charge Ordering, and Chirality-Induced Spin Selectivity,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(31), 27749–27767 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c06549

Y. DAIGO, Y. KAWASUGI, H. M. YAMAMOTO, R. KATO and N. TAJIMA, “Off-Diagonal Thermoelectric Effect and Its Gate Tuning in Molecular Conductor κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl,” *Appl. Phys. Lett.* **126**(26), 261901 (2025). DOI: 10.1063/5.0278441

T. SATO, H. GOTO and H. M. YAMAMOTO, “Sturdy Spin-Momentum Locking in a Chiral Organic Superconductor,” *Phys. Rev. Res.* **7**(2), 023056 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.7.023056

B-3) 総説, 著書

H. M. YAMAMOTO, “Spin-Induced Chiral Selectivity and Its Possible Application to Asymmetric Synthesis,” *Yuki Gosei Kagaku Kyokaishi/Journal of Synthetic Organic Chemistry*, **83**(11), 1035–1040 (2025). DOI: 10.5059/yukigoseikyokaishi.83.1035

B-4) 招待講演

佐藤拓朗, 「キラリティが駆動する有機強相関スピン物性」, 山田研究会「量子液晶概念を基盤とした新奇物性科学の若手学際研究」, 仙台, 2025年11月.

山本浩史, 「CISS 効果と時間反転対称性」, 第3回ATFコンファレンス, 沼津, 2025年11月.

佐藤拓朗, 「構造キラリティと強相関量子物性」, X-TREME 新興の学際的課題に向けた探究, 九州大学, 福岡, 2025年10月.

山本浩史, 「Chirality and electron spin」, CEMS Colloquium, 理化学研究所, 和光, 2025年9月.

佐藤拓朗, 「CISS 効果と非線形応答」, キラル若手の会, 静岡大学, 静岡, 2025年9月.

佐藤拓朗, 「キラルな有機強相関超伝導における巨大スピン軌道結合」, 第14回酸化物研究の新機軸に向けた学際討論会, 大阪大学, 吹田, 2025年9月.

山本浩史, 「CISS 効果の現状と固体CISS 効果から分かること」, 近畿大学応用化学科セミナー, 大阪, 2025年7月.

H. M. YAMAMOTO, “Materials’ chirality and electrons’ spins,” Symposium on Molecular Chirality 2025, Nagoya, May 2025.

H. M. YAMAMOTO, “Chirality, Electron Spin, and CISS,” The 2nd International Conference on Nano Energy and Technology (ICNEAT-2026), Shantou (China), March 2026.

H. M. YAMAMOTO, “Spin polarization created by chirality,” International Workshop on Spins and Molecules, Sicily (Italy), January 2026.

T. SATO, “Giant nonreciprocal superconductivity induced by chirality,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2025), Honolulu, Hawaii (USA), December 2025.

H. M. YAMAMOTO, “Chirality Induced Spin Selectivity in Chiral Conductors,” VISTEC Seminar, Rayon (Thailand), December 2025.

H. M. YAMAMOTO, “Dynamical Chirality, Electron Spin, and CISS,” Core-to-core Bordeaux, Bordeaux (France), November 2025.

H. M. YAMAMOTO, “Chirality-Induced Spin Selectivity in chiral solids,” PIERS 2025 (Photonics and Electromagnetics Research Symposium), Chiba, November 2025.

H. M. YAMAMOTO, “Spin Selectivity and Non-reciprocal Conductivity in Chiral Superconductors,” The 9th Thailand International Nanotechnology Conference (NanoThailand 2025), Bangkok (Thailand), November 2025.

T. SATO, “Chirality: A platform for nontrivial spin-momentum locking in superconductors,” International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (ISCOM 2025), Toyohashi (Japan), September 2025.

H. M. YAMAMOTO, “Molecular chirality, electron spin, and CISS,” Tornado online, online, September 2025.

H. M. YAMAMOTO, “True and False Chirality and CISS Effect,” Symposion on chiral molecules and organic radicals, Bucharest (Romania), July 2025.

H. M. YAMAMOTO, “Chiral Molecules and Solids for Spintronics,” 20th Asian Chemical Congress (20ACC), Bangkok (Thailand), June 2025.

T. SATO, “Gigantic nonreciprocal superconductivity induced by chirality,” EMERALD core-to-core workshop, Tianjin University, Tianjin (China), April 2025.

B-5) 特許出願

登録

ZL202080036002.X, “Chirality Detection Device, Chirality Detection Method, Separation Device, Separation Method, and Chiral Substance Device,” Y. TOGAWA, H. SHISHIDO and H. M. YAMAMOTO (University Public Corporation Osaka, National Institute of Natural Sciences), 2020 年. (登録日 2025 年 4 月 25 日)

特許第 7720582 号, 「スピン偏極電流を生成する導電性構造体, それを用いた電極及び方法」, 須田理行, 山本浩史 (自然科学研究機構), 2021 年. (登録日 2025 年 7 月 31 日)

B-6) 受賞, 表彰

Y. NABEI, Springer Nature Poster Prize at 16th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (2025).

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 (2025–2027).

学会の組織委員等

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

出前授業「超伝導に関する講演と実験紹介」岡崎北高等学校 (2025). (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–).

International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (ISCOM), 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–2028 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).

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).

科学技術振興機構 ERATO 研究, 「山本量子キラル変換プロジェクト」, 山本浩史 (2025 年度–2030 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–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(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).

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）

松田 定治（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：動的乱れが導く遅延ダイナミクスとイオン輸送
- c) 凝縮系ダイナミクスの理論研究：非平衡揺らぎが駆動する特異的拡散現象

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。さらに，LHCII 三量体の量子ダイナミクスを解析し，励起エネルギーの移動がどのような経路をどのような時間スケールで起こっているかが明らかになってきた。
- b) 凝縮系ダイナミクスに関する研究として，凝縮系物理学における長年の課題の一つである「温度低下のダイナミクスの遅延化」に対し，時間に依存する反応速度に基づく理論開発を進めてきた。とくに，「動的乱れ」の概念に基づき，過冷却液体における運動の遅延化に関する分子機構の解明を進めている。また，水のように，運動の遅延化の温度依存性が超アレニウス型からアレニウス型に変化する「fragile-strong 転移」も知られているおり，その起源の解明にも取り組んでいる。さらに，我々の理論と機械学習分子動力学を組み合わせ，無機ガラス固体電解質におけるイオン伝導性の解析を海外の共同研究者と行った。その結果，イオン伝導率の非単調な組成依存性の実験結果を再現するとともに，これまで予想されていたものとは異なる機構で Li^+ イオンのイオン伝導が起こっていることも明らかになってきた。
- 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。重水の発見以来ほぼ 1 世紀が経つが，水の同位体はほとんど同一の物理化学的特性をもつため，その分離は依然として非常に困難なままである。最近，動的なナノポアを持つソフト多孔性結晶では，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、その分離機構の解明については全く進んでいない。そこで、我々は揺らぐエネルギー地形上での拡散現象を解析する理論モデルを開発し、エネルギー揺らぎと障壁越えダイナミクスの共鳴により、平衡系における質量に基づく拡散の違いを大きく上回る分離性能が実現されることを示した。我々の理論枠組みは、実験結果を再現するにとどまらず、その背後にある微視的起源の物理機構を解明し、選択的分離の理解の深化およびその予測を可能にした。その結果、本研究により、材料の固有の構造ゆらぎを調整するか外部刺激を加えることで輸送特性を設計できる動的多孔性材料の新たな設計原理を提案した。この研究と並行して、液体的およびガラス的な環境の間を切り替える二状態系における粒子拡散を記述する理論モデルを開発した。この理論モデルにより、不均一環境においては、均一な環境よりも拡散が増大することを理論・計算により示すとともに、不均一な媒体における粒子輸送の統一的理解に資する簡潔な枠組みを示した。

B-1) 学術論文

- A. KONDO, K. J. FUJIMOTO, S.-I. KODA, S. SAITO and T. YANAI**, “Osimertinib’s Proton-Catalyzed, Pseudoconcerted EGFR Inhibition Guides Next-Generation Inhibitor Design,” *J. Chem. Inf. Model.* **66**(2), 1203–1213 (2026). DOI: 10.1021/acs.jcim.5c02787
- S. KUMAR, Z. TANG and S. SAITO**, “Dynamic Slowdown and Spatial Correlations in Viscous Silica Melt: Perspectives from Dynamic Disorder,” *J. Chem. Phys.* **164**(2), 024503 (2026). DOI: 10.1063/5.0305680
- F. PERAKIS, T. KAWASAKI and S. SAITO**, “Enhanced Particle Diffusion in Fluctuating Binary Environments,” *Phys. Rev. Res.* **8**(1), L012015 (2026). DOI: 10.1103/1rmr-11yb
- T. KATO and S. SAITO**, “Proof of the Density Variation Equation Conjectured for Exact Density Functional Theory,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **94**(11), 115002 (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.115002
- S. SENDO, K. J. FUJIMOTO, T. MIYASHITA, S. SAITO and T. YANAI**, “Assessment of the Time Correlation Function-Based Approach for Absorption Spectrum Calculations Using Time-Dependent Density Functional Theory and Molecular Dynamics Simulations,” *J. Chem. Phys.* **163**(13), 134116 (2025). DOI: 10.1063/5.0281605
- B. KANG, J. YU, S. SAITO, J. JANG and B. J. SUNG**, “Non-Monotonic Ion Conductivity in Lithium-Aluminum-Chloride Glass Solid-State Electrolytes Explained by Cascading Hopping,” *Adv. Sci.* **12**(35), e09205 (2025). DOI: 10.1002/advs.202509205
- G. R. KHAN, S. SAITO and S. DASCHAKRABORTY**, “Faster Diffusion of Water along Carbon Nanotubes near the Wall,” *J. Phys. Chem. B* **129**(26), 6561–6573 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c02233
- T. KATO and S. SAITO**, “A Rigorous Expression of the Hohenberg–Kohn Universal Energy Functional Based on the Analysis of the Spatial Scaling Property of the Kohn–Sham Potential,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **94**(7), 074303 (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.074303
- Y. FURUIKE, Y. ONOUE, S. SAITO, T. MORI and S. AKIYAMA**, “The Priming Phosphorylation of KaiC Is Activated by the Release of Its Autokinase Autoinhibition,” *PNAS Nexus* **4**(5), pgaf136 (2025). DOI: 10.1093/pnasnexus/pgaf136
- S.-I. KODA and S. SAITO**, “Correlated Flat-Bottom Elastic Network Model for Improved Bond Rearrangement in Reaction Paths,” *J. Chem. Theory Comput.* **21**(7), 3513–3522 (2025). DOI: 10.1021/acs.jctc.4c01549

B-3) 総説, 著書

甲田信一, 「変分的反応経路最適化法に基づく高効率の遷移状態探索および尤もらしい反応経路生成」, アンサンブル, **27(1)**, 27–34 (2025).

B-4) 招待講演

斉藤真司, 「揺らぎが引き起こすダイナミクス」, テラバイオワークショップ 2025, 京都府木津川市, 2025 年 9 月.

S. SAITO, “Fluctuation-Driven Emergent Dynamics in Condensed-Phases: Thermodynamic Anomalies and Dynamic Slowdown,” Kyoto (Japan), March 2026.

S. SAITO, “Fluctuation-Driven Emergent Dynamics in Condensed-Phases: Thermodynamic Anomalies and Dynamic Slowdown,” MCBR2025, Hyderabad 2(India), December 2025.

S.-I. KODA, “Alternative tools for double-ended transition state search,” Telluride Science Workshop 2025 “Computational Materials Chemistry,” Telluride, Colorado (USA), July 2025.

S. SAITO, “Unveiling molecular mechanisms of dynamic slowdown in supercooled liquids,” 2025 GSRC symposium on Chemical dynamics in materials and living systems, Seoul (Korea), May 2025.

S. SAITO, “Unveiling the Role of Dynamic Disorder in the Slowing Down of Supercooled Water Dynamics,” APATCC11, Kobe (Japan), April 2025.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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 (2022–).

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-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」, 斉藤真司 (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」, 斉藤真司 (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–2025 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」, 斉藤真司 (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ついては、高等植物のLHCIIにおける励起エネルギー移動(EET)の分子機構の解明を進める。EETの分子論的解明には、LHCII系の個々のChl分子の電子状態とダイナミクスを適切に記述することが不可欠である。我々は、これらの物理量を適切に記述するための方法論を開発し、膜中に存在するLHCIIにおけるEET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EETを解析し、LHCIIにおける高速なEETダイナミクスを分子レベルで理解することを目指す。とくに、LHCIIにおけるEETとこれまでに行ってきたFMOタンパク質のEETを比較し、天然光合成系におけるEET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EETの普遍性と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ありふれた現象に思えるが、その分子論的理解は依然として十分ではない。そこで今後、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、より体系的な理解を目指す。

また、拡散過程に関して、簡便な理論モデルに基づき、構造揺らぎが引き起こす非平衡揺らぎにより、静的状態では見られない同位体間での顕著な拡散特性の違いを明らかにした。今後は、この理論モデルの分子論的・定量的な検討を進めるとともに、さらなる拡散特性・分離機能の開拓に向けた理論的基盤の構築を図る。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こなかった新たな視点からのアプローチとして、今後は、イオンチャネルの高速イオン透過がどのような機構によって実現されているのかなどの解明をも目指す。

計算分子科学研究部門

江原 正博（教授）（2008 年 6 月 1 日着任）

白男川 貴史（助教）

ZHAO, Pei（特任助教）

WANG, Yuelin（特任助教）

ZHAO, Yaoxiao（特任研究員）

杉本 緑（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) 銀一原子導入による高核数銀ナノクラスターの発光性能の向上
- b) 銀錯体の修飾による銀ナノクラスターの円偏光発光活性の増幅
- c) ジハロベンゼンを用いた還元的アリール化による単層カーボンナノチューブの近赤外光発光制御
- d) 六方晶窒化ホウ素層におけるモアレポテンシャルの原子スケール観察と理論解析
- e) 新規な螺旋状金属クリプタンドによる脂肪族側鎖を有するアミノ酸誘導体のサイズ選択的認識
- f) サイズ選択型白金サブナノクラスター触媒：Ni および Co 合金化による酸素還元反応の活性向上

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 金属ナノクラスターは光物性や触媒活性で注目されるが，発光機能はクラスター構造と相関しており，室温での量子収率が低いことが実用化の観点から課題となっている。これまで様々な設計が試みられてきたが，高核数クラスターでは未だ高い発光量子収率は実現していない。本研究では，高核数銀ナノクラスター（Ag₇₈, Ag₇₉）において，銀原子 1 原子を導入し，輻射・無輻射減衰経路の両方を制御することで，室温発光量子収率を 77 倍向上させることに成功した。DFT 計算と理論解析によって，導入した銀 1 原子が電子分布を変化させ，発光特性に影響を与えること，発光機構を改変することを明らかにした。本研究は，高核数銀ナノ粒子の構造－特性相関に関する有用な知見を与え，金属ナノクラスターの実用化に向けた発光効率向上のための戦略を提供するものである。
- b) 円偏光発光（CPL）は，励起状態における分子系のキラル光学特性を解析する強力な手法である。本研究では，CPL 測定により銀ナノクラスターの励起状態キラル光学特性の変化を明らかにした。最近，負に帯電した Ag₂₉ ナノクラスターの外部ケージにカチオン性銀（I）錯体を修飾することで，三重項励起状態が安定化され，近赤外領域の発光強度が増強されることを報告した。本研究では，CPL 活性の非対称性因子（ $|g_{lum}|$ 値）が 1×10^{-3} 未満から 6×10^{-3} へと増加し，Ag₂₉ ナノクラスターの CPL 特性が向上することを実証した。また，蛍光寿命測定と組み合わせた低温 CPL 測定によって，CPL 活性の変化を計測した。理論解析によって，カチオン性銀（I）錯体の修飾によって，銀ナノクラスター内の電荷移動が誘起され，発光波長が低エネルギー側にシフトし，発光強度が増強することを明らかにした。
- c) 単層カーボンナノチューブ（SWCNT）の化学修飾は，近赤外発光を制御するのに有効である。これまで系統的な研究を実施してきたが，本研究では，ナフタレンナトリウム，ハロゲン化ベンゼンおよびジハロゲン化ベンゼン誘導体を用いて SWCNT を還元的アリール化することで，その発光特性を制御した。ヨードベンゼンで官能基化された (6,5)

SWCNT は、1100 nm および 1230 nm に2つの新しい発光ピークを示した。DFT 計算を用いて、アリアル化 SWCNT のモデル化合物の相対安定性および遷移エネルギーを計算し、結合配置の相対安定性は付加基によって異なることを示し、遷移エネルギーを結合配置によって制御できることを明らかにした。さらに、単離した (6,5) SWCNT に熱処理を行い、透過型電子顕微鏡を用いて、SWCNT 上の化学修飾を初めて観察することに成功した。

- d) モアレ超格子は、ファンデルワールス層間のねじれ角や層の相対配置によって電子状態を調整できる新たな二次元機能性材料である。モアレ超格子の特性は、層間結合によって誘起される静電ポテンシャルであるモアレポテンシャルと密接に関連している。本研究では、特別な化学的剥離技術を用いて、特定のねじれを有する六方晶窒化ホウ素 (hBN) ナノ層を得る方法を開発した。本方法で作製した hBN ナノ層は原子レベルで清浄かつ歪みがないため、モアレポテンシャルの調査に理想的な単結晶層を与える。ねじれ hBN ナノ層に対する高分解能透過型電子顕微鏡測定 (HRTEM) により、フーリエ空間におけるモアレ回折スポットを観測し、逆高速フーリエ変換によりモアレポテンシャルを構築した。DFT 計算によって、局所的な層間原子重なりが、モアレポテンシャルの周期性と分布を決定する上で重要な役割を果たすことを明らかにした。
- e) 新しいトリス型メタロクリプタンンド LNi_3 を設計・合成した。結晶構造解析により、メソ型ではなく右巻き (P) と左巻き (M) のらせん型エナンチオマー対が存在することが明らかになり、この構造と安定性は DFT 計算でも支持された。この LNi_3 ホストは、アミノ酸誘導体を認識でき、脂肪族側鎖を有するアミノ酸に対して選択性を示した。その形状保持性によりサイズに基づく識別が可能であり、 ^1H NMR 測定によって実証された。一部のゲスト分子の認識は CD シグナルが生じ、 LNi_3 の P/M らせん反転平衡が偏っていることが示唆された。3つの脂肪族側鎖ゲスト (Val, Ile, Leu) は M 型優位なシフトを示し、2つの π 含有側鎖ゲスト (Arg, Trp) では P 型が優位であった。理論計算によって、複数の非共有結合的相互作用が作用して、各々の包接化合物の M 型 / P 型の安定性を決めていることを明らかにし、CD スペクトルの詳細な帰属を行った。この金属包接体 LNi_3 は、アルキル側鎖を有する低極性アミノ酸の認識における識別限界を克服し、分子認識、生化学的センシング、エナンチオマーセンシングにおける応用が期待される。
- f) プロトン交換膜燃料電池 (PEMFC) は、低い作動温度とカーボンニュートラルな性質から、持続可能なエネルギー源として有望視されている。一方、酸素還元反応 (ORR) 用の従来の白金 (Pt) 系触媒の高コストと活性が課題である。本研究では、サイズ・組成選択的堆積法で調製した、ニッケル (Ni) またはコバルト (Co) と合金化した原子レベルで精密な Pt 系サブナノクラスターの ORR 活性を、構造に基づく観点から調査した。炭素担持合金サブナノクラスターの系列 (Pt_nNi_m : $n = 3-7$, Pt_nCo_m : $n = 4-8$) について ORR 質量活性を評価した結果、 Pt_5Ni_1 , Pt_5Co_1 , Pt_6Ni_2 , Pt_6Co_2 は市販標準 Pt/C の 2.1 ~ 2.5 倍の活性を示した。EXAFS と DFT 計算を用いた構造解析により、合金化サブ NC 内部での電荷分布を明らかにした。炭素担体への結合は2つの Pt アンカー原子でなされ、Ni および Co 原子はアンカー化されていないことを示した。これらの知見は、原子性制御された合金サブナノクラスターが、活性向上と調整可能な電子構造を備えた次世代 PEMFC 触媒のための合理的な設計基盤を提供することを実証している。

B-1) 学術論文

Z. LEI, P. ZHAO, S. KIKKAWA, X.-L. PEI, W.-T. LIU, H. UBE, S. YAMAZOE, M. EHARA and M. SHIONOYA, "Hypercarbon-Centered Gold(I)-Copper(I) Clusters Exhibiting a Dissolution/Crystallization-Induced Photoluminochromism," *Chem. Eur. J.* **32**(11), e00011 (2026). DOI: 10.1002/chem.202600011

- T. NAKAJIMA, S. TASHIRO, M. EHARA and M. SHIONOYA**, “Entropic Control of the Helicity Inversion Rates of Twisted Metallomacrocycles by Reversible and Regioselective Deprotonation,” *J. Am. Chem. Soc.* **148**(5), 5338–5346 (2026). DOI: 10.1021/jacs.5c18601
- A. AKIYAMA, S. HOSSAIN, S. BISWAS, T. SHIRAOGAWA, P. ZHAO, D. ARIMA, T. KAWAWAKI, Y. NIIHORI, M. MITSUI, M. EHARA and Y. NEGISHI**, “Ligand-Driven Structural Modulation and Enhanced Photoluminescence in High-Nuclearity Ag₅₆ Nanoclusters: Special Collection: Functional Metal Clusters,” *Aggregate* **7**(2), e70270 (2026). DOI: 10.1002/agt2.70270
- Y. MAEDA, A. SUWA, K. KAWADA, P. ZHAO, M. EHARA, Y. SUZUKI, Y. IGUCHI, Y. TAKI, Y. KONNO, M. YAMADA, H. KASAI, K. KIMOTO and K. HARANO**, “Role of Second Halogen Atoms of Dihalobenzene in Controlling the Photoluminescence Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes by Reductive Arylation,” *ACS Nanosci. Au* **6**(2), 270–280 (2026). DOI: 10.1021/acsnanoscienceau.5c00152
- Y. WANG and M. EHARA**, “Enhanced Photocatalytic Activity of NH₃-SCR on Sulfur-Doped TiO₂ (101) Surface,” *ChemCatChem* **18**(2), e01345 (2025). DOI: 10.1002/cctc.202501345
- W. W. WANG, X. M. MA, X. ZHAO and M. EHARA**, “Mechanistic Insights into Regioselective Functionalization of Metallofullerene La@C₈₂ under Synergistic External and Built-in Electric Fields,” *J. Org. Chem.* **90**(48), 17121–17127 (2025). DOI: 10.1021/acs.joc.5c02359
- B. ZHOU, P. ZHAO, J. GUO, S. HU, X. GUO, J. LIU and C. LI**, “Solvent-Additive Cascade Engineering Enables Single-Oriented Perovskite Films with Facet-Driven Performance and Stability,” *Energy Environ. Sci.* **18**(22), 9865–9876 (2025). DOI: 10.1039/D5EE04415D
- J. F. YAO, P. ZHAO, F. HU, Y. N. YANG, Z. A. NAN, Q. Q. HUANG, J. Y. LI, J. CHEN, Z. LEI, Q. H. WEI, M. EHARA and Q. M. WANG**, “ α -Hydroxyalkynyl-Protected Copper(I) Acetylenediide Nanoclusters with Anion-Dependent Photoluminescence,” *Nanoscale* **17**(43), 25289–25296 (2025). DOI: 10.1039/D5NR03301B
- A. AKIYAMA, S. HOSSAIN, S. BISWAS, T. SHIRAOGAWA, P. ZHAO, M. NAKAMOTO, D. OGATA, T. KAWAWAKI, Y. NIIHORI, J. YUASA, M. EHARA and Y. NEGISHI**, “Triggering Photoluminescence in High-Nuclear Silver Nanoclusters via Extra Silver Atom Incorporation,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(41), 37231–37241 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c10289
- W. ISHII, T. SHIRAOGAWA, M. EHARA, H. SOTOME, H. MIYASAKA, T. KAWAI and T. NAKASHIMA**, “Evolution of Circularly Polarized Luminescence in Atomically Precise Silver Nanoclusters with Intrinsic Chirality,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(45), e202513118 (2025). DOI: 10.1002/anie.202513118
- A. OHNUMA, P. ZHAO, K. MATSUNAGA, K. TAKAHASHI, T. MASUBUCHI, T. INOUE, Y. WANG, M. EHARA, N. ICHIKUNI and A. NAKAJIMA**, “Size-Selected Platinum Subnanocluster Catalysts Alloyed with Nickel (Pt_nNi_m $n = 3–7$, $m = 1–3$) or Cobalt (Pt_nCo_m $n = 4–6$, $m = 1–2$) for the Oxygen Reduction Reaction,” *ACS Appl. Nano Mater.* **8**(34), 16748–16758 (2025). DOI: 10.1021/acsanm.5c02782
- J. WANG, S. HU, Z. CHEN, Z. YUAN, P. ZHAO, A. DASGUPTA, F. YANG, J. YAO, M. A. TRUONG, G. KUSCH, E. Y. H. HUNG, N. R. M. SCHIPPER, L. BELLINI, G. J. W. AALBERS, Z. LIU, R. A. OLIVER, A. WAKAMIYA, R. A. J. JANSSEN and H. J. SNAITH**, “Exposing Binding-Favourable Facets of Perovskites for Tandem Solar Cells,” *Energy Environ. Sci.* **18**(15), 7680–7694 (2025). DOI: 10.1039/D5EE02462E

- T. SHIRAOGAWA, S. L. KRUG, M. EHARA and O. A. VON LILIENFELD**, “Antisymmetry Rules of Response Properties in Certain Chemical Spaces,” *J. Chem. Phys.* **163**(2), 024133 (2025). DOI: 10.1063/5.0271350
- S. FIRDAUSIAH, R. IDE, M. EHARA, P. ZHAO, Y. SAKATA and S. AKINE**, “Novel Helical Metallocryptand for Size-Selective Recognition of Amino Acid Derivatives with Aliphatic Side Chains,” *Chem. –Eur. J.* **31**(36), e202501277 (2025). DOI: 10.1002/chem.202501277
- R. MISHIMA, T. NAGAI, H. SEGAWA, M. EHARA and T. UCHINO**, “Atomic-Scale Observation of Moiré Potential in Twisted Hexagonal Boron Nitride Layers by Electron Microscopy,” *J. Phys. Chem. C* **129**(16), 7813–7822 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c00804
- B. ZHOU, P. ZHAO, J. GUO, S. HU, X. GUO, J. LIU and C. LI**, “Unveiling the Importance of Nondominant Facets in (111)-Dominated Perovskite Films,” *ACS Appl. Mater. Interfaces* **17**(15), 22715–22726 (2025). DOI: 10.1021/acsami.5c01238
- Y. HAN, H. ZHENG, J. HE, M. LI, M. EHARA and X. ZHAO**, “Stabilities Referring to the f Electron Effect in Erbium-Based Endohedral Metallofullerenes: Revisiting $\text{Er}_2\text{@C}_{80}$ and the Missing $\text{Er}_2\text{C}_2\text{@C}_{78}$,” *Inorg. Chem.* **64**(16), 8302–8312 (2025). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5c00661
- Y. HAN, M. LI, M. EHARA and X. ZHAO**, “Unveiling Fullerene Formation and Interconversion through Molecular Dynamics Simulations with Deep Neural Network Potentials,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27**(18), 9767–9773 (2025). DOI: 10.1039/D5CP00837A
- S. HU, X. SUN, W. LIU, L. GREGORI, P. ZHAO, J. PASCUAL, A. DALLMANN, A. DASGUPTA, F. YANG, G. LI, M. ALDAMASY, S.-H. TURREN-CRUZ, M. A. FLATKEN, S. FU, Y. IWASAKI, R. MURDEY, A. HOELL, S. SCHORR, S. ALBRECHT, S. YANG, A. ABATE, A. WAKAMIYA, F. DE ANGELIS, M. LI and H. J. SNAITH**, “Accessing Metal-Containing Species in Tin–Lead Perovskite Precursor Solutions *via* Molecular Strategies Guided by the Hard–Soft Acid–Base Principle,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(41), e202514010 (2025). DOI: 10.1002/anie.202514010

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

江原正博, 「金属ナノクラスターの光物性と触媒機能: 理論計算からのアプローチ」, ナノ学会第 23 回大会, 東京, 2025 年 5 月.*

M. EHARA, “Interaction between Orbital Angular Momentum Light and Molecules using Real-time Kohn-Sham DFT–Maxwell’s Equations Approach,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), “New Era of Chiral Light-Matter Interaction Effects [PHYS016],” Honolulu, Hawaii (USA), December 2025.

M. EHARA, “From PCM-SAC-CI to Inverse Design Approach,” Molecular Properties & Solvation: Celebrating the Career of Roberto Cammi, Pisa (Italy), September 2025.

M. EHARA, “Theoretical Chemistry for Electronic Resonance States of Molecules,” Frontiers and Advances in Chemistry: Theory & Synthesis (FACTS2025), New Delhi (India), August 2025.

M. EHARA, “Photofunctional Metal Clusters and Heterogenous Catalysts: Collaborations with Experiment,” 11th Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemistry, Kobe (Japan), April 2025.

T. SHIRAOGAWA, “Antisymmetry rules of response properties in certain chemical spaces,” The 13th World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2025), Oslo (Norway), June 2025.

T. SHIRAOGAWA, “Antisymmetry Rules for Relationships of Material Properties in Chemical Compound Space,” The 11th Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC-11), Kobe (Japan), April 2025.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

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–).

量子化学研究協会理事 (2006–2026).

理論化学会幹事選出委員 (2023–2025).

学会の組織委員等

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

American Chemical Society ACS Fall 2025 Digital Meeting Global Virtual Symposia (GVS), Development of Theoretical Methods, Algorithms and Applications to Relevant Chemical Problems, Symposium Chair (2024–2025).

The 15th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics, Local Organization Committee (2025–2026).

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計算材料科学センター共同利用委員会および採択専門委員会委員 (2021–2027).

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 (2025). (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).

量子化学スクール 世話人 (2023–). (白男川貴史)

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, 「基礎物理化学 I」, 2025 年 7 月.

総合研究大学院大学先端学術院, 「基礎物理化学 I」, 2025 年 7 月. (白男川貴史)

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–2025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」(代表者: 塩谷光彦), 江原正博(共同研究者) (2022年度–2027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）

BAMRUNG, Phonphiphat（インターンシップ）

TRUONG, Linh Hoai（インターンシップ）

森 丈（大学院生）

鶴間 稜平（大学院生）

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) 流れによるタンパク質凝集促進メカニズムの解明
- b) 英国型アミロイドベータ変異体の凝集促進機構の解明
- c) カフェインによるタウタンパク質凝集阻害機構の解明
- d) エネルギー散逸系におけるシンプレクティック数値解法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 生体内で血液やリンパ液などの流れがあるとタンパク質の凝集が促進される。このようにして生成されたタンパク質凝集体はアルツハイマー病などの病気の原因となる。しかし、流れによるタンパク質凝集促進機構はこれまで分かっていなかった。この問題を解決するため、我々は一昨年度、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。昨年度はこの手法を用いてアミロイド $\beta(16-22)$ ペプチドの凝集過程のシミュレーションを行い、流れがある場合には流れがない場合よりもペプチドの凝集が促進されることを示した。これは実験と一致する結果である。さらにその理由を以下のように解明した。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早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載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。しかし、これまで仮説として「流れにより分子が変形するからではないか？」あるいは「流れにより分子の向きがそろうからではないか？」という考えも提唱されていた。今年度、我々は慣性モーメントが流れにより変化しないことから流れによる変形はほとんどないことを見出した。また、分子の配向も計算し、向きはそろわず、単に回転しているだけであることも見出した。結果、これらの仮説を否定し、昨年度我々が発見した機構が正しいことを改めて確認した。
- b) アルツハイマー病はアミロイド β ペプチドが凝集し、オリゴマーやアミロイド線維を形成、沈着することが原因で発症する。A β うち N 末端付近のアミノ酸が置換された一部の変異体は凝集速度が速く、若年性アルツハイマー病を引き起こすことが知られている。しかし、その凝集加速機構はまだ分かっていない。そこで、本研究では若年性アルツハイマー病を引き起こす変異体のうち英国型変異体（H6R）についてその単量体構造を調べた。我々がこれまでに開発してきた効率的に構造サンプリングできる手法であるレプリカ置換分子動力学法を用いた。その結果分子内 β シート構造の安定性が英国型では野生型よりも高いことを発見し、その理由も解明した。これまでの我々の研究により分子内 β シート構造が分子間 β シート構造の形成を促進することが分かっている。このため、英国型変異体では分子内 β シート構造の安定性が高まることにより分子間 β シート構造が形成されやすくなり、その結果、凝集性が高まると考えられる。

- c) アルツハイマー病の原因タンパク質として、アミロイドβとともに知られているのがタウタンパク質である。アミロイドβが比較的早期に凝集するのに対し、タウタンパク質はアミロイドβが凝集した後に凝集する。タウタンパク質の凝集はカフェインにより阻害されるという実験結果が報告されているが、そのメカニズムは分かっていなかった。そこで、我々はタウタンパク質のアミロイド線維の周辺にカフェイン分子を加えた分子動力学シミュレーションを実行した。その結果、カフェインは既に凝集したタウタンパク質の分子間βシート構造を壊すことはないものの、アミロイド線維の成長末端に多く付着し、タウタンパク質がそれ以上伸長するのを阻害している様子が観察された。この研究により、アルツハイマー病の原因物質の形成をカフェインが阻害するメカニズムを明らかにした。
- d) 生体分子系は原子、分子レベルで見れば全エネルギーの保存する保存系である。保存系のシミュレーションではハミルトニアンが存在するので、シンプレクティック数値積分法が存在する。シンプレクティック数値積分法に基づくシミュレーションでは影のハミルトニアンが存在するので、長時間数値積分を行ってもハミルトニアンはよく保存する。このため保存系のシミュレーションではよく用いられている。しかし、よりマクロな視点に立ち、粗視化したシミュレーションを行う場合には、各粒子の持つエネルギーは溶媒に吸収され、全エネルギーは保存しない。このようなエネルギー散逸系でのシンプレクティック解法はこれまで存在していなかった。しかし、積分因子を適切に選び、その積分因子がかかった運動方程式を与えるラグランジアンならば存在する。さらに、ルジャンドル変換が可能であれば、このラグランジアンに対応するハミルトニアンも存在する。このハミルトニアンを用いることで、散逸系においてもシンプレクティック解法を導けることを初めて示した。その一例として、減衰振動を取り上げ、そのシンプレクティック解法を導出した。この手法を用いると影のハミルトニアンが存在し、長時間数値積分を行ってもハミルトニアンはよく保存する。本研究で得た知見をもとに今後、より一般的な非保存系に対するシンプレクティック数値積分法の開発が期待される。

B-1) 学術論文

- A. I. FARAH, S. G. ITOH and H. OKUMURA**, “Molecular Dynamics Simulations of Amyloid-β(29–42) Aggregation in Bulk Water and at the Air–Water Interface,” *Biophys. Physicobiol.* **22(4)**, e220033 (2025). DOI: 10.2142/biophysico.bppb-v22.0033
- N. A. SULONG, H. OKUMURA, S. G. ITOH, C. F. CHEE, M. R. JOHAN and V. S. LEE**, “Computational Analysis and Molecular Dynamics Simulation of Metformin Derivatives as Potential α-Glucosidase Inhibitors for Type 2 Diabetes,” *Results Chem.* **18**, 102905 (2025). DOI: 10.1016/j.rechem.2025.102905
- T. SAITO, T. ISHIYAMA, M. SAKONO, S. G. ITOH and H. OKUMURA**, “Oligomerization Mechanism of Amyloid-β Peptides at Hydrophobic Interfaces Revealed by Molecular Dynamics Simulations,” *J. Phys. Chem. B* **129(27)**, 6794–6804 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c01837
- H. X. SUZUKI, H. OKUMURA and S. G. ITOH**, “Why Do Histone Monomethylation and Dimethylation Cause a Significant Difference in Binding to LEDGF?” *J. Chem. Phys.* **162(18)**, 185102 (2025). DOI: 10.1063/5.0259337

B-3) 総説、著書

- 小山宏史, 伊藤篤史, 奥村久士, 藤森俊彦, 「多細胞シミュレーションと細胞間のペアポテンシャルの推定」, アンサンブル, **27(2)**, 138–148 (2025).

B-4) 招待講演

H. OKUMURA, “Molecular dynamics simulation of amyloid- β aggregation under equilibrium and nonequilibrium conditions,” The 63rd Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan Symposium “Exploring the reality of biological clusters through information science and advanced imaging,” Nara, 2025年9月.

奥村久士, 「Computational physics of disease-related protein aggregates」, 日本物理学会第 80 回年次大会計算物理領域シンポジウム, 東広島市, 2025 年 9 月.

奥村久士, 「各種統計アンサンブルの生成法」, 第 19 回分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで—, 岡崎市 (ハイブリッド開催), 2025 年 9 月.

奥村久士, 「Structural Dynamics of Biological Systems Observed by Molecular Dynamics Simulation: Formation of Amyloid- β Aggregates and Their Destruction by Infrared Laser」, 第 21 回 AMO 討論会「生体系の超高速過程と構造ダイナミクス」, 岡崎市, 2025 年 6 月.

H. OKUMURA, “Protein Aggregation Observed by Molecular Dynamics Simulation,” Pure and Applied Chemistry International Conference 2026 (PACCON2026), Phitsanulok (Thailand), February 2026.

H. OKUMURA, “Molecular Dynamics Simulation of Protein Aggregates,” Conference on Modeling Chemical and Biological (Re)Activity 2025 (MCBR2025), Hyderabad (India), December 2025.

H. OKUMURA, “Molecular Dynamics of Amyloid- β Aggregation: Insights into Alzheimer’s Pathogenesis,” Frontier Bioorganization Forum 2025, Okazaki (Japan), November 2025.

H. OKUMURA, “Exploring Alzheimer’s Mechanisms via Molecular Dynamics,” 8th International Conference on Computation for Science and Technology, Jakarta (Indonesia), October 2025.

H. OKUMURA, “Mechanism of Protein Aggregation Revealed by Molecular Dynamics Simulation,” The 28th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE 28), Pathum Thani (Thailand), July 2025.

H. OKUMURA, “Molecular Dynamics Simulation of Protein Aggregation,” 20th Asian Chemical Congress, Bangkok (Thailand), June 2025.

B-6) 受賞, 表彰

奥村久士, 日本生物物理学会第 11 回 *Biophysics and Physicobiology* Editors’ Choice Award (2025).

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–).

第 39 回分子シミュレーション討論会学生優秀発表賞審査員 (2025).

分子科学討論会 2025 「生体関連分子」分野優秀講演賞選考委員 (2025).

第 63 回日本生物物理学会年会学生発表賞審査員 (2025).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

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 (2024–2026).

その他

分子動力学シミュレーションの普及を目的として, 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-ilPk> 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。この動画は公開から約 3 年 3 カ月で視聴回数は約 1 万回を超えている。全国の学生や若手研究者に広く利用され, 分子動力学教育の発展と人材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–.

名古屋市立大学大学院薬学研究科, 創薬生命科学特別講義「疾患関連生体分子の分子動力学シミュレーション / Molecular dynamics simulation of disease-related biomolecules」, 2025 年 4 月.

名古屋大学, GTR 次世代講義「分子動力学シミュレーション 入門と体験」, 2025 年 7 月.

中京大学, 非常勤講師, 2025 年 4 月–2026 年 3 月. (伊藤 暁)

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) 若年性アルツハイマー病を引き起こすアミロイド β 変異体としての英国型変異体 (H6R) とともに知られているのが鳥取型変異体 (D7N) である。これらの変異体はともに凝集速度が野生型より早いだけでなく, 分子構造は互いに異なることも知られている。英国型変異体の凝集体は分子間 β シート構造を多く形成する一方, 鳥取型変異体の凝集体はあまり分子間 β シート構造を形成しない。しかし, 構造が異なる理由は分かっていない。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) アミロイド β ($A\beta$) ペプチドは神経細胞の表面で凝集し, 神経細胞を破壊する。最近の研究で $A\beta$ ペプチドの凝集のしやすさは細胞表面の曲率にも依存することが分かってきた。曲率半径が小さいほど $A\beta$ ペプチドが凝集しやすい。しかし, その理由はまだ明らかになっていない。そこで, 非平衡分子動力学シミュレーションにより曲率の大きい膜モデルを作り, その上に $A\beta$ ペプチドを配置した分子動力学シミュレーションを現在行っている。同様に平らな脂質二重膜上での $A\beta$ ペプチドのシミュレーションも行っている。今後, 膜の相互作用による $A\beta$ ペプチドの構造変化を解析し, 膜の曲率が $A\beta$ ペプチドの凝集しやすさに影響を与える機構を解明したい。
- c) 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, これまでに我々は 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。

- d) タンパク質など多くの自由エネルギー極小状態を持つ系では、自由エネルギー障壁を乗り越え、多くの構造を効率的に探索するためにレプリカ交換法がよく用いられている。我々はこの方法よりもより効率的な構造探索を可能とするレプリカ置換法を開発した。この方法ではメトロポリス法の代わりに諏訪・藤堂法を用いて3つ以上のレプリカ間で温度の置換を行う。さらに、最近この方法を改良したマルチレプリカ置換法を考案した。この手法をプログラムに実装し、タンパク質系に応用することでその性能向上を定量的に議論する。
- e) これまでにエネルギー散逸系における初めてのシンプレクティック数値解法として減衰振動におけるシンプレクティック解法を開発した。ここでは調和振動子ポテンシャル中の減衰振動を対象としたが、今後はより一般的なポテンシャルエネルギー系における減衰運動を対象としてシンプレクティック数値解法を開発する。

岡崎 圭一（准教授）（2020 年 12 月 1 日着任）

大貫 隼（助教）

関 健仁（大学院生）

GUYOT, Constantin（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) トランスポーターの基質輸送メカニズムの解明
- b) タンパク質が引き起こす細胞膜変形メカニズムの解明
- c) 分子モーターの 1 方向性運動メカニズムの解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) トランスポータータンパク質は、構造変化をすることで基質を細胞膜内外へ輸送する。構造予測 AI である AlphaFold や分子動力学（MD）シミュレーションにより、構造変化を介した基質輸送メカニズムの解明を行っている。まず、「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。次に、MD シミュレーションにより、病原性細菌が有する呼吸鎖酵素である Na^+ 輸送性 NADH-キノン酸化還元酵素（ Na^+ -NQR）における電子伝達と共役した Na^+ 輸送の分子メカニズムを解明した。さらに、MD シミュレーション、AlphaFold による構造予測、マルコフ状態モデルによる解析を組み合わせたアプローチにより、効率的な構造サンプリングを実現し、自由エネルギーや構造遷移パスを解析する手法の開発を行っている。
- b) 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、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、チューブ状膜とダイナミンの大規模多量体からなる粗視化シミュレーション系を構築して、ダイナミンの膜切断に関する新たな分子メカニズムを提案した。つまり、ダイナミン多量体のリング構造が GTP 加水分解に伴う構造変化によりゆるむことで結合している場所の膜を膨らませ、離れた部位の膜を収縮させる“indirect”な細胞膜収縮（切断）メカニズムをシミュレーションにより示した。
- c) 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 ATP 合成酵素（ $\text{F}_1\text{-ATPase}$ ）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動力学（MD）シミュレーションによって解明した。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ると、合成方向に回転させたときのみ阻害因子 IF_1 が構造変化して解離することが分かった。また、阻害因子 IF_1 結合状態における回転のトルク・仕事は通常時より 20% 程度増加することが分かり、阻害状態解除に必要なプロトン駆動力を見積もることができた。

B-1) 学術論文

K. OKADA, K. OKADA, K. OKAZAKI, T. MORI, K. KIM and N. MATUBAYASI, “Deep Learning of Commitor for Ion Dissociation and Interpretable Analysis of Solvent Effects Using Atom-Centered Symmetry Functions,” *J. Chem. Phys.* **164**(9), 094101 (2026). DOI: 10.1063/5.0315825

M. ISHIKAWA-FUKUDA, T. SEKI, J. KISHIKAWA, T. MASUYA, K. OKAZAKI, T. KATO, B. BARQUERA, H. MIYOSHI and M. MURAI, “The Redox Driven Na⁺-Pumping Mechanism in *Vibrio cholerae* NADH-Quinone Oxidoreductase Relies on Dynamic Conformational Changes,” *Nat. Commun.* **17**, 1394 (2026). DOI: 10.1038/s41467-026-69182-w

M. I. MAHMOOD, S. KUBO, H. NOGUCHI and K. OKAZAKI, “Membrane Constriction by Dynamin through GTP-Driven Conformational Changes from Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations,” *J. Phys. Chem. Lett.* **16**, 12411–12418 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpclett.5c02867

R. KOBAYASHI and K. OKAZAKI, “Rotation-Direction-Dependent Mechanism of the Inhibitor Protein IF₁ for Mitochondrial ATP Synthase from Atomistic Simulations,” *JACS Au* **5**(6), 2654–2665 (2025). DOI: 10.1021/jacsau.5c00261

B-3) 総説, 著書

大貫 隼, 岡崎圭一, 「AlphaFold ×分子動力学シミュレーションによるタンパク質構造状態の効率的探索」, *生物物理*, **66**(1), 6–10 (2026). DOI: 10.2142/biophys.66.6

B-4) 招待講演

岡崎圭一, 「V₀ モーターおよびトランスポーターによるイオン輸送の MD シミュレーション」, cQUEST シンポジウム「膜タンパク質内部のイオン透過を考える」, 柏, 2025 年 12 月.

岡崎圭一, 「Elucidating and Controlling Functional Dynamics of Biomolecular Machines Using Molecular Simulations and Machine Learning」, 信州大学アクア・リジェネレーション機構 (ARG) データ駆動型 AI セミナー, 長野, 2025 年 11 月.

岡崎圭一, 「AlphaFold と分子シミュレーションで迫るトランスポーターの基質輸送メカニズム」, 第 98 回日本生化学会大会, AlphaFold の今——AI が拓く次世代の生命科学, 京都, 2025 年 11 月.

岡崎圭一, 「分子シミュレーションと AlphaFold の統合的アプローチによるトランスポーターの構造変化予測」, 日本薬物動態学会第 40 回年会, トランスポーター DIS, 京都, 2025 年 10 月.

K. OKAZAKI, “Tubular membrane constriction induced by conformational change of dynamin-1 from coarse-grained molecular dynamics simulations,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), “Lipids on the Move: From Membrane Biophysics to Synthetic Lipid Nanoparticles and Artificial Organelles,” Honolulu (USA), December 2025.

K. OKAZAKI, “Molecular Simulation of Functional Motions in Biomolecular Machines Facilitated by AlphaFold and Coarse-Grained Model,” SMART Symposium: 2025 Frontier in Computational Chemistry, Biophysics, and Biological Sciences, Shenzhen (China), October 2025.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

分子シミュレーションスクール世話人 (2016-).

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

東京大学大学院農学生命科学研究科, 非常勤講師, 「分子シミュレーションによる生体分子マシンの機能発現ダイナミクス解明」, 2025 年 2 月-6 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).

科研費学術変革領域研究(A), 「AlphaFold と分子シミュレーションの統合による分子モーターの構造変化制御」, 岡崎圭一 (2025 年度-2026 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。トランスポータータンパク質については, 従来の手法では困難であったリガンド結合による構造変化を AlphaFold で予測する新手法の開発を行っている。さらに, MD シミュレーション, AlphaFold による構造予測, マルコフ状態モデルによる解析を組み合わせたアプローチをさまざまなトランスポーターへ適用したい。細胞膜変形については, 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では結局最後の切断までのシミュレーションは成功しなかったため, 現実の細胞環境に近い条件でのシミュレーションを検討する。さらに, ミトコンドリア内膜等の多種多様なタンパク質が関わる細胞内現象への展開も目指す。回転モーター ATP 合成酵素の阻害因子 IF₁ については, AI デザインツール等も取り入れた機械学習手法を開発して, 共同研究者による実験結果をフィードバックしながら, 強力な阻害因子のデザインを目指している。

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（准教授（兼任））

富田 隆文（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）

MAGRO, Valentin Nicolas Walter（特任研究員）

LIENHARD, Vincent（特任研究員）

LORANCA CRUZ, Luisa Fernanda（招へい研究員）

岡田 満哉（特別訪問研究員）

仲田 公明（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）

西岡 稚子（特任専門員）

越田 陽子（特任専門員）

ANTHOINE-MILHOMME, Valentin Timothée（特任専門員）

SCHMID, Maximilian Otto（インターンシップ）

MEMBREZ, Gaetan（インターンシップ）

PINOCHE, Berengere（インターンシップ）

MICAGLIO, Giorgio（インターンシップ）

KAWATA, Shun（インターンシップ）

PARKPROM, Pongpol（インターンシップ）

DESMURS, Fabien（インターンシップ）

VAN-EIMERN, Moritz（インターンシップ）

UDOMMAI, Parinya（インターンシップ）

MARCELINO, Maximilien（インターンシップ）

SENOUCI, Sami（インターンシップ）

VIDOR, Guilhem（インターンシップ）

GODARD, Theo（インターンシップ）

GIANGRECO, Lorenzo（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)
ANTONIO, Jorge (大学院生)
渡部 元輝 (大学院生)
小田川 陽陸 (大学院生)
新川 聖也 (大学院生)
鶴田 笑子 (技術支援員 (派遣))
佐藤 琢美 (技術支援員 (派遣))
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4件を行っている。

B-1) 学術論文

K. NISHIMURA, H. SAKAI, T. ANDO, T. TOMITA and S. DE LÉSÉLEUC, “Optimization-Based Hologram Design for Fine Optical Tweezer Arrays and Extension of Super-Resolution Criteria,” *Phys. Rev. A* **113**(1), 013119 (2026). DOI: 10.1103/xhb8-jlxh

V. LIENHARD, R. MARTIN, Y. T. CHEW, T. TOMITA, K. OHMORI and S. DE LÉSÉLEUC, “Generation of Motional Squeezed States for Neutral Atoms in Optical Tweezers,” *Phys. Rev. Lett.* **135**(25), 253404 (2025). DOI: 10.1103/3kwz-ny2h

M. KUNIMI and T. TOMITA, “Proposal for Realizing Heisenberg-Type Quantum-Spin Models in Rydberg-Atom Quantum Simulators,” *Phys. Rev. A* **112**(5), L051301 (2025). DOI: 10.1103/c97b-my2w

C. NILL, S. DE LÉSÉLEUC, C. GROß and I. LESANOVSKY, “Resonant Stroboscopic Rydberg Dressing: Electron-Motion Coupling and Multi-Body Interactions,” *Phys. Rev. A* **111**(4), L041104 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevA.111.L041104

T. DENECKER, Y. T. CHEW, O. GUILLEMANT, G. WATANABE, T. TOMITA, K. OHMORI and S. DE LÉSÉLEUC, “Measurement and Feedforward Correction of the Fast Phase Noise of Lasers,” *Phys. Rev. A* **111**(4), 042614 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevA.111.042614

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

大森賢治,「量子スピード限界で動作する中性原子型・超高速量子コンピュータ」, 2026年第73回応用物理学会春季学術講演会, 東京科学大学大岡山キャンパス本館, 東京都目黒区, 2026年3月.

大森賢治,「中性原子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2026～誤り耐性型汎用量子コンピュータの実現を目指して～, ベルサール秋葉原, HALL A/B, 東京都千代田区, 2026年3月.

大森賢治,「将来への展望」,「アト秒の日」(10月18日)登録記念式典, 東京大学先端科学技術研究センター ENEOS ホール, 東京都目黒区, 2025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」, JASIS2025分析機器・科学機器総合展トピックスセミナー「量子コンピュータ」, 幕張メッセ, 千葉県千葉市, 2025年9月.

大森賢治,「量子力学100年の謎」, 大阪・関西万博スペシャルトーク『攻殻機動隊×量子コンピュータ』(EXPO2025 SPECIAL TALK『GHOST IN THE SHELL』×『QUANTUM COMPUTER』)特別講義, 大阪・関西万博EXPO メッセ「WASSE」 「エンタングル・モーメントー [量子・海・宇宙] ×芸術」展ステージ, 大阪府大阪市, 2025年8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」, 電子情報通信学会 システムナノ技術に関する特別研究専門委員会主催第6期第2回研究会「量子情報分野におけるナノ構造・制御技術」, オンライン開催, 2025年6月.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Physikalisches Kolloquium, Emmy-Noether-Campus, Universität Siegen, Siegen (Germany), January 2026.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” International Conference on Quantum Information Science and Technology (ICQIST 2025), CQuERE, TCG CREST, Kolkata (India) (Hybrid), December 2025.* (Plenary talk)

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Optica Incubator on Petahertz Electronics, Optica Global Headquarters, Washington D.C. (USA), November 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” JQI (Joint Quantum Institute) Special Seminar, The Physical Sciences Complex at the University of Maryland, College Park (USA), November 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” 2nd Japan-Denmark Symposium On Practical Quantum Computing, Hillside Terrace, Hillside Plaza, Tokyo (Japan), October 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” 2nd International Workshop on Quantum Information Engineering (QIE2025), Okinawa Institute of Science and Technology, Seaside House, Onna, Okinawa (Japan), October 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Quantum Control of Light and Matter Gordon Research Conference (GRC), Salve Regina University, Newport (USA), August 2025.

K. OHMORI, “Large-scale and high-coherence fault-tolerant quantum computer with dynamical atom arrays,” Moonshot Goal 6 Session in Quantum Innovation 2025, Congrès Square Grand Green Osaka, Osaka (Japan), August 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” The Rochester Conference on Coherence and Quantum Science (CQS-12), Sloan Auditorium, University of Rochester, Rochester (USA), June 2025.

K. OHMORI, “Ultrafast quantum computing with ultracold atom arrays at quantum speed limit,” Optics & Photonics International Congress 2025, PACIFICO Yokohama, Kanagawa (Japan), April 2025.* (Plenary talk)

B-5) 特許出願

出願

PCT/JP2024/044357, 「パルス光出力システム, パルス光出力方法, 中性原子励起方法及び量子コンピュータ装置」, 松原卓也, シルヴァン ド レゼルック, 富田隆文, 素川靖司, 大森賢治 (自然科学研究機構), 2024 年.

登録

US/12580093, 「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), 2023 年. (登録日 2026 年 3 月 17 日)

B-6) 受賞, 表彰

TIRUMALASETTY PANDURANGA, Mahesh, レーザー学会学術講演会第46回年次大会論文発表奨励賞 (2026).

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 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) (2024–).

日本分光学会代議員 (2022–).

欧州研究会議 (European Research Council: ERC, EU) パネル評価者 / 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–).

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–).

経済産業省「ポスト 5G 情報通信システム基盤強化研究開発事業」, 「繰り返し量子誤り訂正を可能とする Dual-Yb 型量子コンピュータの開発」プロジェクト, 分子研チーム研究開発統括 (2025–).

理科教育活動

科学技術振興機構日本未来館常設展示「量子コンピュータ・ディスク」監修協力 (2025). (富田隆文)

講演講師「光ピンセット中性原子 量子コンピュータ」文部科学省 第一線の講師陣と量子技術を学ぶサマースクール 2025 (OIST) (2025). (富田隆文)

ワークショップ「Focused workshop on atom move」量子コンピュータ関連研究者及び学生の技術交流 (2026). (Sylvain de LÉSÉLEUC, 富田隆文)

その他

内閣府・ムーンショット型研究開発事業・目標 6「誤り耐性型汎用量子コンピュータ」第 1 期 (2022 年 11 月–2025 年度) および第 2 期 (2026–2030 年度) のプロジェクトマネージャーとして、極めて高額の外部資金を獲得 (「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。

内閣府・ムーンショット型研究開発事業・目標 6「誤り耐性型汎用量子コンピュータ」のステージゲート審査 (2025 年 10 月 6 日) に合格することによって、第 1 期 (2022 年 11 月–2025 年度) に引き続き、第 2 期 (2026–2030 年度) のプロジェクトマネージャーにも任命され、分子研のプレゼンス向上と研究力アピール、および財政に大きく貢献。

文科省・光・量子飛躍フラッグシッププログラム Q-LEAP (2018–2027 年度) の大規模基礎基盤研究の研究代表者として、高額の外部資金を獲得 (「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。

文科省「先端国際共同研究推進事業 (ASPIRE)」において、日本–ドイツ共同研究「量子技術」領域 (2024–2029 年度) の研究代表者に任命され、高額の外部資金を獲得 (「B-10」競争的資金) の項を参照) することで、分子研の国際的なプレゼンス向上と研究力アピール、および財政に大きく貢献。

経産省・ポスト 5G 情報通信システム基盤強化研究開発事業における「繰り返し量子誤り訂正を可能とする Dual-Yb 型量子コンピュータの開発」プロジェクトの分子研チーム研究開発統括 (2025–2027 年度) に任命され、高額の外部資金を獲得 (「B-10」競争的資金) の項を参照) することで、分子研のプレゼンス向上と研究力アピール、および財政に大きく貢献。

大森ムーンショットプロジェクト第 1 期の最大の成果の一つとして、日本初・世界でも数少ない中性原子型のフルスタック量子コンピュータを大森が率いる分子研チームが中心となって完成させた。現在、細部の最終調整中であるが、既に社会的に大きな注目を集めており、一般社団法人量子技術による新産業創出協議会 Q-STAR ご一行 (2026 年 2 月 27 日) をはじめとして様々な企業や報道機関らが視察に来所された。これらによって、産学官のさまざまな分野における分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

文科省、講談社、自然科学研究機構、分子研の共催によって、2025 年 8 月 15 日、大阪・関西万博における大森と押井守監督 (映画 GHOST IN THE SHELL / 攻殻機動隊) とのスペシャルトークショー (冒頭で大森による「量子力学 100 年の謎」についての講演) が開催された。当日は立ち見溢れる超満員の盛況となった。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、2023 年 10 月よ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、岡崎信用金庫をはじめとする 13 社、および 1 国立研究所産総研 G-QuAT の参画を得るとともに、会社設立のためのさまざまな議論や準備活動を進め 2025 年 4 月 1 日、国内初となる中

性原子型・量子コンピュータのハード開発を行う株式会社 Yaqumo の設立に繋がった(これに伴って同協議体は当初目的達成の上、解散)。

8-3 情報発信に記載されている通り、過去 1 年に限っても日本経済新聞(4 度紙面に掲載)、中日新聞などをはじ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おり、また、米国科学誌サイエンスの中性原子型・量子コンピュータ特集記事に数少ない世界のリーダーとして取り上げられるなど国際的にも大きく注目されている。さらに、大阪・関西万博における攻殻機動隊・押井守監督とのスペシャルトークショーへの大森の出演など、これらの継続的かつ多様な媒体における報道によって、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。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(2023-2025)、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(2023-2025)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。同審議会での大森の任期は 10 年ルールにより 2025 年度で公式には終了したが、その後も文部科学省からの要請で、同省の科学技術政策へのアドバイザーとして貢献を継続している(2026 年 3 月現在)。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。

中性原子型・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、米国 Science 誌 2025 年 7 月 10 日号の中性原子型・量子コンピュータ特集記事で数少ない世界のリーダーの一人としてハイライトされるなど、関連報道が現在も継続している(web ニュース等については、<https://ohmori.ims.ac.jp/kenjiohmori/> 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、横浜で開催された国際会議 Optics & Photonics International Congress 2025 (プレナリー講演)、ドイツのジューゲン大学コロキウム、インドの TCG CREST にて開催の International Conference on Quantum Information Science and Technology (ICQIST) 2025 (プレナリー講演)、米国ロチェスターで開催された 6 年に 1 度の伝統ある国際会議 CQS-12 Rochester Conference on Coherence and Quantum Science (ボードメンバーとしてアジアから唯一招待)、米国 RI 州ニューポートで開催された Gordon Research Conference on Quantum Control of Light and Matter、米国ワシントン D.C. の OPTICA (米国光学会)本部にて開催された Optica Incubator on Petahertz Electronics、米国メリーランド大学にて開催の JQI (Joint Quantum Institute) Special Seminar 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。

2024 年度に 3 度の政策アクション会議に招かれ、各省・局長級のトップ官僚、あるいは政府系金融機関・幹部を始めとする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った。これを契機に引き続き同幹部との関係が継続、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。

大手新聞社による分子研・大森グループ訪問・取材(2025年4月16日;予備取材5月20日オンライン)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。

米国サイエンス誌のAdrian Cho 記者による大森へのオンライン取材(2025年5月2日)に際して、自身の量子コンピュータ研究開発に関するレクチャーを行った。この取材に基づいて、米国サイエンス誌 2025年7月10日号の中性原子型・量子コンピュータ特集記事(FEATURE ARTICLE)「Atomic explosion」において、世界でも数少ない中性原子型・量子コンピュータ研究開発のリーダーの一人としてフィーチャーされた。これによって世界的な分子研の知名度・プレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

大手通信会社ご一行の分子研・大森グループ訪問(2025年5月15日)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。

大手報道機関の大森へのオンライン取材(2025年7月18日および9月24日)に際して、大森グループの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。

日本政府量子コンピュータ施策関係者ご一行の分子研・大森グループ訪問(2025年8月18日)に際して、大森グループ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。

日本政府量子コンピュータ施策関係者らの分子研・大森訪問(2025年9月19日)に際して、大森グループ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。

海外の量子コンピュータスタートアップからのリクエストで面談を行い(2025年11月5日)今後の協力関係の要請を受けた。これによって、分子研の世界的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

国際的ベンチャーキャピタルからのリクエストで面談を行い(2025年11月26日)分子研の世界的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

大手新聞会社の取材(2025年12月8日)を受け、分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

ドイツ初の量子コンピュータ・スタートアップ「eleQtron 社」(Siegen 市)の本社に招かれ、視察・面談を行ない、引き続き創業者Christof Wunderlich 氏が教授を務めるSiegen 大学でコロキウム講演を行った(2026年1月22日)。これにより、ドイツの産業界およびアカデミアに対して、分子研の世界的なプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。日本政府量子施策関係者らと面談を行い(2026年3月13日)、今後の日本政府の量子技術政策の立案に貢献するとともに、文科省に対する分子研のプレゼンス向上と研究力アピールに大きく貢献。

分子研フルスタック量子コンピュータに関して大手報道機関の取材の取材(2026年3月17日)を受け、分子研の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–。

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–2027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)。

経済産業省「ポスト 5G 情報通信システム基盤強化研究開発事業 (量子産業化) / ポスト 5G 情報通信システムの開発 / 繰り返し量子誤り訂正を可能とする Dual-Yb 型量子コンピュータの開発」, 大森賢治 (分子研研究総括) (2025年度–2027年度)。

B-11) 産学連携

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 (2022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. Infleqion (米国), 「Technologies for cold-atom based fault-tolerant quantum computing : Research and development of Quantum Processing Unit (QPU)」, 大森賢治 (2023年度–)。

共同研究, キュエル (株), 「量子コンピュータの制御装置・ミドルウェアの開発」, 大森賢治 (2024年度–)。

共同研究, (株) Yaqumo, 「高度光技術を用いた量子コンピュータに関する研究」, 大森賢治 (2025年度–)。

共同研究, (株) Yaqumo, 「ポスト 5G 情報通信システム基盤強化研究開発事業 (量子産業化) / ポスト 5G 情報通信システムの開発 / 繰り返し量子誤り訂正を可能とする Dual-Yb 型量子コンピュータの開発」, 大森賢治 (2025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（若手研究者雇用特別研究員）

WULIJI TAOGETAO（特任専門員）

三浦 直也（特別共同利用研究員）

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単位接合機構の研究
- 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を確立した。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捉えた。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. MATSUI, K. HAGIWARA, Y. SATO, R. SAGEHASHI and S. SUGA, “Spin and Orbital Polarizations of Au(111) Surface State Determined by Photoelectron Momentum Microscope,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **94**, 114707 (9 Pages) (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.114707

L. X. CAO, Y. SHEN, K. ZHANG, Z. H. SU, S. C. FENG, X. M. HU, Y. H. ZHANG, B. F. WANG, Y. Y. LI, X. GAO, W. J. WANG, S. KERA, N. UENO, Y. Q. LI and J. X. TANG, “In Situ Interface Reaction Enables Efficient Deep-Blue Perovskite Light-Emitting Diodes,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64(39)**, e202513617 (2025). DOI: 10.1002/anie.202513617

Y. NAKAYAMA, Y. KOYAMA, S. MIYATA, J. MIYAMOTO, T. HOSOKAI, K. FUKUTANI, S. KERA, R. KUMARA, T. KOGANEZAWA, F. KOBAYASHI and M. TADOKORO, “Epitaxial Molecular Heterojunction with Spontaneous Charge Transfer: A Novel Strong Acceptor, Perfluorotetraazaphthalene, on Single-Crystal Pentacene,” *Synth. Met.* **314**, 117941 (2025). DOI: 10.1016/j.synthmet.2025.117941

C. DE, K. FUKUTANI, J. SEO, R. STANIA, K. YAJI, K. KURODA, K. SHIMADA, J. S. KIM, H. W. YEOM and S.-W. CHEONG, “Multiple Magnetic Transitions, Anomalous Hall Effect, and Tunable Surface States in $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_4\text{Te}_7$,” *Phys. Rev. B* **112**, 085151 (2025). DOI: 10.1103/7swz-xkrt

Y. HASEGAWA, T. YAMAGUCHI, M. MEISSNER, T. UEBA, F. BUSSOLOTTI, S. IDETA, K. TANAKA, S. YANAGISAWA and S. KERA, “Fingerprinting Weak Electronic Interaction at a van der Waals Interface: Fano Signatures in a Pentacene Monolayer on Graphite,” *Phys. Rev. B* **112**(8), 085301 (2025). DOI: 10.1103/2k7h-h8jm

Y. YU, B. F. WANG, Y. SHEN, Y. T. WANG, Y. H. ZHANG, Y. Y. LI, Z. H. SU, L. X. CAO, S. C. FENG, Y. H. WU, X. Y. GAO, S. KERA, N. UENO, J. X. TANG and Y. Q. LI, “Efficient Blue Perovskite LEDs via Bottom-Up Charge Manipulation for Solution-Processed Active-Matrix Displays,” *Adv. Mater.* **37**(37), 2503234 (2025). DOI: 10.1002/adma.202503234

F. NISHINO, P. KRÜGER, C. H. WANG, R. NEMOTO, Y. H. CHANG, T. HOSOKAI, Y. HASEGAWA, K. FUKUTANI, S. KERA, M. HORIE and T. YAMADA, “Reversible Sliding Motion by Hole-Injection in Ammonium-Linked Ferrocene, Electronically Decoupled from Noble Metal Substrate by Crown-Ether Template Layer,” *Small* **21**(7), 2408217 (2024). DOI: 10.1002/sml.202408217

M. KIM, D. MIYAGI, I. TAMAI, Y. MAEYAMA, Y. OGUCHI, S. INOUE, R. NAKAZAWA, J. JIA, H. ISHII and Y. SHIGESATO, “Impact of Nitrogen Doping on Leakage Current of p-Type Cu₂O-Based pn Junctions for Ga₂O₃ Power Device Applications,” *Phys. Status Solidi RRL* **19**(11), 2400396 (2025). DOI: 10.1002/pssr.202400396

R. NAKAZAWA, M. KITAOKA, R. KAIMORI, M. TATENO, R. HOSHIKAWA, Y. TANAKA and H. ISHII, “Determining the Density of In-Gap States in Organic Semiconductors: A Pitfall of Photoelectron Yield Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. C* **130**(9), 3418–3427 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c07058

B-4) 招待講演

解良 聡, 「有機材料の光電子分光計測：物性の次元性と階層性」, 分子科学討論会, 広島, 2025年9月.

K. FUKUTANI, “Phonon-dressed quasiparticles and excitonic insulator transition in TiSe₂,” 1st International Workshop on Advanced Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy, Sapporo (Japan), January 2026.

S. KERA, “Characteristic electronic properties of organic molecular solids,” Global conference on condensed matter physics 2025, Praha (Czech), April 2025.

S. KERA, “Deep insight into the characteristic electronic properties of organic molecular solids by spectroscopic view,” International conference on emerging technologies (ICET), Sabaragamuwa (Sri Lanka), April 2025.

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

VSX・SX 高輝度光源利用者懇談会会長 (2024–2026).

応用物理学会プログラム編集委員 (2025–). (福谷圭祐)

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しシンクロトロン光センター運営委員会委員 (2023-2025), 将来計画検討委員会委員 (2025-2026).

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-).

文部科学省研究振興局科学技術・学術審議会専門委員 (2025-2027).

学会誌編集委員

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Editorial Board (2015-).

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理工学府, 連携客員教授, 2014年9月-.

千葉大学大学院融合理工学府, 「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-.

豊田工業大学, 修士・博士一貫教育プログラム学生メンター, 2025年4月-2026年3月.

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).

科研費特別研究員奨励費, 「準粒子相互作用による新たな電荷ダイナミクスの開拓と有機光エレクトロニクスへの展開」, 中澤遼太郎 (2025年度-2027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電子状態解析
- c) 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
- d) 複合的な生化学反応のオペランド軟X線吸収分光計測

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，溶液の状態を詳細に調べるために，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，大規模な分子系の内殻励起計算法を確立した。これにより，りん酸の水和構造，有機溶媒中のシリケートの構造，トリエチルアミン水溶液の相転移現象を調べている。また，高分子鎖の一部を切り出すことで，溶液中の高分子の内殻励起計算を実現して，その相転移現象を調べている。
- 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により，金属錯体の配位子の窒素 K 吸収端 XAS 測定から，その電子状態やスピン状態を議論できることを見出した。また，中心金属の XAS 測定から中心金属の電子状態が分かり，XAS による金属錯体の中心金属と配位子の電子状態の解析法を確立した。これにより，クロロフィルにおけるフィトール鎖の役割，アルミニウム錯体における溶媒の配位構造，鉄錯体におけるオキソ種の生成などを調べている。
- c) 超高速レーザーと放射光から発生する軟X線パルスを 100 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 法を開発した。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調べた。現在，光緩和過程への溶媒分子，溶液温度などの影響を時間分解 XAS 計測により調べている。更に，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。
- d) 生化学反応のオペランド XAS 計測を目指した手法開発を行っている。水溶液中のミオグロビンのヘム鉄のスピン状態の変化を窒素 K 吸収端 XAS 計測により調べた。タンパク質のポリペプチド鎖には大量の窒素原子が含まれるが，ポルフィリン環の窒素に由来するピークとエネルギー位置が異なるため，分離して観測できることを見出した。また，内殻励起計算から，異なる状態のヘム鉄のスピン状態を調べて，室温のミオグロビン溶液にスピン平衡を示す状態があることを見出した。今後は，光化学系 II タンパク質の XAS 測定を行い，将来的にその光合成反応の機構解明を行う予定である。

B-1) 学術論文

- H. XU, F. KUMAKI, M. NAGASAKA and T. SASAKI**, “N K-Edge XAS Measurements for Ionic Liquids and N-Heterocycle Molecules in Liquid Phase Analyzed by Simulations with Explicit Inclusion of Solvent Molecules,” *J. Chem. Phys.* **164**(10), 104502 (2026). DOI: 10.1063/5.0315131
- H. IWAYAMA, H. YUZAWA and M. NAGASAKA**, “Phase-Dependent Intermolecular Interactions of Nematic Liquid-Crystal Molecules Probed by Carbon K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Phys. Rev. E* **113**(1), 015413 (2026). DOI: 10.1103/17prb3wv
- F. KUMAKI, S. TSURU, S. YAMASHITA, J. ADACHI and M. NAGASAKA**, “Electronic Structures of Chlorophyll a Investigated by Nitrogen K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy under a Radiation-Induced Effect,” *J. Phys. Chem. A* **130**(1), 222–228 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpca.5c07907
- R. TAKAHASHI, F. KUMAKI, J. ADACHI, Y. NISHIMOTO, M. YASUDA and M. NAGASAKA**, “Soft X-Ray Absorption Spectroscopy for Analysing Aluminium Complexes in Solution,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27**(44), 24017–24023 (2025). DOI: 10.1039/D5CP03440J
- H. TEDZUKA, H. SAITO, N. MATSUMOTO, M. NAGASAKA, H. SATO, Y. SEKINE and T. SUGIMOTO**, “Nonthermal Catalytic Origin in DC-Enhanced Dry Reforming of Methane Unveiled by Multimodal Operando Analyses,” *J. Phys. Chem. Lett.* **16**, 12973–12981 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpclett.5c03159
- Y. YAMADA, Y. TOYODA, M. NAGASAKA, N. NAKATANI, T. KOITAYA, A. KUZUME and K. TANAKA**, “Room-Temperature Direct Spectroscopic Observation of High-Valent Terminal Iron-Oxo Species of a μ -Nitrido-Bridged Iron Phthalocyanine Dimer Deposited on a Highly Oriented Pyrolytic Graphite Surface,” *ChemistryEurope* **3**(5), e202500277 (2025). DOI: 10.1002/ceur.202500277
- K. HARADA, A. SAKAI, S. TSUNEKAWA, Y. TAKAKI, M. NAGASAKA, H. YUZAWA, K.-H. WANG, T. INA, H. KONDOH and M. YOSHIDA**, “Improved Water Electrolysis Over Cobalt Oxyhydroxide by Carbonate Anion Adsorption: Direct Observation of Active Species Using Operando Hard/Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *ChemSusChem* **18**(16), e202500559 (2025). DOI: 10.1002/cssc.202500559
- S. TSURU and M. NAGASAKA**, “Solvatochromism Observed in the X-Ray Absorption Spectrum of Indole Dissolved in Water,” *J. Phys. Chem. A* **129**(13), 3020–3031 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpca.5c00456

B-3) 総説, 著書

- M. NAGASAKA, F. KUMAKI, Y. YAO, J. ADACHI and K. MOCHIZUKI**, “Polymer Cononsolvency Explored Using Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Photon Factory Highlights*, **2024**, 24–25 (2025).
- Y. KUDO, F. KUMAKI, M. NAGASAKA, J. ADACHI, Y. NOGUCHI, N. KOGA, H. ITABASHI and M. HIYAMA**, “Core-Electron Excitation of Firefly Luciferin with Carbon XAS Measurements,” *Photon Factory Highlights*, **2024**, 18–19 (2025).
- 長坂将成, 「軟X線吸収分光法による溶液のオペランド計測: 錯体化学と高分子化学への展開」, *Vac. Surf. Sci.*, **68**(4), 226–231 (2025). DOI: 10.1380/vss.68.226
- 為則雄祐, 長坂将成, 「軟X線技術」, *XAFSの基礎と応用 第2版*, 179–190 (2025).

B-4) 招待講演

長坂将成,「軟X線吸収分光法による液体と固液界面のオペランド計測」,第86回応用物理学会秋季学術講演会シンポジウム「ナノバイオテクノロジー分野における実験と分子シミュレーションのインタープレイ」,名古屋,2025年9月.

長坂将成,「軟X線吸収分光法による溶液のオペランド計測」,岩澤コンファレンス2025「持続可能な社会をささえる最先端サイエンス」,東京,2025年6月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第3回PF-UAサマースクール「広がる放射光の利用研究」実行委員長(2025).

文部科学省,学術振興会,大学共同利用機関等の委員等

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(B),「複合的な生化学反応のオペランド軟X線吸収分光計測」,長坂 将成(2025年度–2027年度).

科研費基盤研究(B),「未利用有機資源の有効利用に資する超分子型難分解性有機物電解酸化触媒システムの開発」(代表者:山田 泰之),長坂 将成(研究分担者)(2025年度–2027年度).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験S2課題,「軟X線吸収分光法による固液界面上の化学反応のオペランド計測」,長坂 将成(2025年度–2028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～2026年3月31日)

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きた。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きた。
- 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きた。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きた。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と光渦の相互作用に関する基礎研究を進めてきた。
- 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た。

- 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きた。

B-1) 学術論文

T. FUJI, T. TANAKA, T. KANEYASU, Y. KIDA, K. IMAMURA, S. HASHIMOTO, A. GOCHO, K. KANESHIMA, Y. TANAKA and M. KATOH, “Spectral Phase Interferometry for Direct Electric-Field Reconstruction of Chirped Wavepackets Generated from a Tapered Undulator,” *Opt. Lett.* **50(24)**, 7604–7607 (2025). DOI: 10.1364/OL.582624

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トロン光研究センター, 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–.

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トロン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トロン光研究センター、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きた。

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た。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た。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、今後の幅広い応用展開に期待したい。

金安 達夫（教授）（2025 年 4 月 1 日着任）

浅井 佑哉（特別共同利用研究員）

神谷 美穂（事務支援員）

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：原子分子物理，加速器科学，放射光科学

A-2) 研究課題：

- a) 時空間構造光の利用開拓
- b) シンクロトロン光源の高性能化に関する研究
- c) 量子ビーム源の開発と応用
- d) 放射光計測技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 時空間構造光の利用開拓：UVSOR に設置されたタンデム型アンジュレータを用いて、二連パルスや光渦など、時空間構造を持つシンクロトロン光の生成技術の確立と利用法の開拓を目指した研究を進めている。二連パルスの利用では原子分子を対象として内殻光電子の波束干渉を捉えることに成功した。この手法は超高速現象の時間観測への応用が期待されており、加速器技術を駆使して二連パルスの制御法を高精度化しつつ、様々な物質系への展開を探索している。また二連パルスの干渉性を生かした軟X線フーリエ分光法の開発や、螺旋波面を持つ光渦ビームの電子分光への応用に着手した。
- b) シンクロトロン光源の高性能化に関する研究：UVSOR 光源の性能向上へ向けた研究開発を進めている。とくに放射光実験の遂行に直結する蓄積ビームの安定化やトップアップ入射の効率化へ向けて、UVSOR 加速器群の運転状況の把握や電子ビームの挙動解明を目的としたマシンスタディを行った。また UVSOR のアップグレードに関する設計研究に着手し、挿入光源の更新案やビーム制御・診断装置の増強の検討を進めている。さらに蓄積リングにおける単一電子のダイナミクスや単一電子が発する光の性質の解明を目指した研究に着手した。
- c) 量子ビーム源の開発と応用：放射光の高フラックス特性を活用したスピン偏極電子源の開発に着手し、電子源の設計製作を行った。
- d) 放射光計測技術の開発：放射光の偏光特性を活用するためには試料位置での偏光評価が欠かせないが、一般的に真空紫外より短い波長域での偏光測定は高度な装置開発を伴う。光と原子の相互作用を利用した簡便な偏光測定装置を開発し、極紫外光の偏光測定に成功した。またシンクロトロン放射の光電場波形の再構築法の開発研究を行い、アンジュレータ放射を測定対象として検証実験に成功した。

B-1) 学術論文

T. FUJI, T. TANAKA, T. KANEYASU, Y. KIDA, K. IMAMURA, S. HASHIMOTO, A. GOCHO, K. KANESHIMA, Y. TANAKA and M. KATOH, “Spectral Phase Interferometry for Direct Electric-Field Reconstruction of Chirped Wavepackets Generated from a Tapered Undulator,” *Opt. Lett.* **50(24)**, 7604–7607 (2025). DOI: 10.1364/OL.582624

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, S. WADA, H. OTA, H. IWAYAMA, K. SHIMIZU, M. FUJIMOTO and M. KATOH, “Attosecond Interferometry Experiments at the Tandem Undulator Beamline BL1U of UVSOR-III Synchrotron,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **3010(1)**, 012086 (2025). DOI: 10.1088/1742-6596/3010/1/012086

Y. IWASAKI, T. KANEYASU, Y. TAKABAYASHI, H. TAKEDA and S. KODA, “Operation of Two Superconducting Wigglers at SAGA Light Source,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **3010(1)**, 012021 (2025). DOI: 10.1088/1742-6596/3010/1/012021

H. TAKEDA, T. KANEYASU, Y. TAKABAYASHI and Y. IWASAKI, “Twenty Years of Operation of the SAGA Light Source,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **3010(1)**, 012013 (2025). DOI: 10.1088/1742-6596/3010/1/012013

B-4) 招待講演

金安達夫, 「シンクロトロン放射と光渦」, 「原子分子素過程研究とプラズマ分光計測の学際的展開」 「原子分子データ応用フォーラムセミナー」合同研究会, 土岐, 2025 年 12 月.

金安達夫, 「アンジュレータ放射の時空間構造とその応用」, 日本物理学会第 80 回年次大会領域 1, 2, 10, ビーム物理領域合同シンポジウム, 東広島, 2025 年 9 月.

金安達夫, 「シンクロトロン放射の時空間構造制御とその利用」, 東京科学大学理学院化学系講演会, 東京, 2025 年 8 月.

金安達夫, 「原子分子科学と放射光源の利用開拓」, 第 3 回 PF-UA サマースクール「広がる放射光の利用研究」, オンライン開催, 2025 年 8 月.

金安達夫, 「シンクロトロン放射のアト秒位相制御とその応用」, 原子衝突学会第 50 回年会「第 50 回記念シンポジウム」, 八王子, 2025 年 8 月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

日本加速器学会年会開催地検討委員 (2025–).

ICPEAC2025, the XXXIV International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Local Organizing Committee (2023–2025).

学会誌編集委員

日本放射光学会誌編集委員 (2023–2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

東京科学大学, 非常勤講師, 2025 年 8 月–9 月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「タンデムアンジュレータの多角的利用法の開発」, 金安達夫 (2025年度–2029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),「フーリエ分光型X線顕微鏡の開発へ向けた放射光干渉制御の基礎研究」, 金安達夫 (2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

UVSOR の極限的な光源性能を生かし、新規光源技術の開発と利用開拓を柱として研究活動を推進していく。タンデムアンジュレータが発する二連パルスや光渦など時空間構造を持つ光の研究では、原子分子系を対象とした実験研究で光と物質の基礎的な相互作用を解明しつつ、新たな放射光計測手法としての応用展開を目指す。時空間構造光の利用には極めて高品質な電子ビームが必須であり、蓄積リングを周回する電子ビームの制御技術や光ビームの操作手法の開発にも取り組む。

UVSOR 光源の高性能化では蓄積ビームの安定化へ向けた研究開発と並行して、現光源の改修による高度化改造や新規光源の可能性についても検討を進める。また単一電子の蓄積技術を活用し、円形加速器における電子ダイナミクスの研究を開拓していく。さらにスピン偏極電子源や二色ビームなどの量子ビーム源の開発研究では、本年度に設計製作した装置を用いてビーム発生試験を行う予定である。偏光測定や光電場測定などの放射光計測技術については適用波長範囲や時間領域を拡大すべく、研究開発を継続していく。

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）

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 6.6MeV 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。また、応力負荷後の緩和過程における欠陥挙動に関するユーザー執筆の論文が *J. Phys.: Conf. Ser.* に掲載された。電子線照射による単原子空孔の導入や水素導入の有無によって緩和過程における欠陥形成が大きく異なる事が分かった。さらに、ガンマ線誘起陽電子寿命測定法の最新の状況についてまとめた論文が *J. Phys.: Conf. Ser.* に掲載された。ガンマ線誘起陽電子寿命測定法では、厚さ数 cm のバルク試料の測定が可能であるが、現在の測定手法では試料の平均的な情報のみを測定可能であった。近年、がん検査に使われる Time of flight positron emission tomography (TOF-PET) の時間分解能が向上しており、この検出器を利用することでバルク試料内部の欠陥分布をイメージングできる可能性がある。現在、測定システム設計のため、シミュレーションコードを用いた計算や機器の選定を行っている。来年度に原理実証実験を行う事を目指している。
- 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。

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。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。

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、理論計算との比較を行った。直線偏光ガンマ線は、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。一方で、円偏光ガンマ線は、ビーム断面の位置によって偏光が変化し、直径 10 mm に広がっている外側の領域では直線偏光に変化することを実証できた。次に、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た。この方法で発生するガンマ線は、中心軸付近がランダム偏光であり、外側の領域は方位角偏光になることが分かった。この結果は、直線偏光ガンマ線のインコヒーレントな重ね合わせによって理論的に理解できる結果であった。開発した偏光計を用いて、これまで実験的に不明であったガンマ線の偏光特性を明らかにすることができた。偏光計を用いたガンマ線の偏光測定についてまとめた論文が *Phys. Rev. Research* に掲載された。

ガンマ線天文学の分野において、エネルギー MeV 領域はその測定の難しさから感度の高い測定がこれまで行われてこなかった。現在そのエネルギー領域をターゲットにした検出器開発が世界で進められている。UVSOR のガンマ線は最大エネルギーが 6.6 MeV であり、また、コリメータの位置を変えることで 3 MeV までエネルギーを変えられる。さらに、宇宙ガンマ線の偏光検出もガンマ線発生個所の磁場分布の測定にとって重要である。上述したように偏光特性を詳細に測定した UVSOR ガンマ線が、このようなガンマ線天文学の需要に合うと考え、該当するコミュニティに宣伝することで新規ユーザー 2 組が UVSOR ガンマ線を使い始めた。

ガンマ線のエネルギー測定には、高純度ゲルマニウム検出器を使用している。MeV ガンマ線は物質に対する透過力が高いために、厚さ 10 cm 程度のゲルマニウム検出器の内部構造によって測定されるエネルギースペクトルが変わり得る。そのため、内部構造がスペクトルに与える影響を理解する事がガンマ線源のエネルギー特性評価にとって重要である。ゲルマニウム結晶内部に入り込んでいる冷却用ロッドの構造が異なる 2 つの検出器を用いて同一ガンマ線のエネルギースペクトル測定を行い、内部構造によってスペクトルが変化することを実験的に示し、シミュレーションとの比較を行った。この結果は、ユーザーが論文にまとめ *Radiat. Phys. Chem.* に掲載された。

B-1) 学術論文

M. OMER, T. SHIZUMA, M. KOIZUMI, Y. TAIRA, H. ZEN, H. OHGAKI and R. HAJIMA, “Effect of Coaxial HPGe Detector Structure on γ -Ray Beam Measurements,” *Radiat. Phys. Chem.* **240**, 113467 (2025). DOI: 10.1016/j.radphyschem.2025.113467

Y. TAIRA, Y. YANG, T. SHIZUMA and M. OMER, “Generation and Measurement of Gamma Rays with Axially Symmetric Polarization States via Compton Scattering,” *Phys. Rev. Res.* **7**, 033130 (2025). DOI: 10.1103/pn68-rjd2

F. HORI, S. ARAKI, Q. XU and Y. TAIRA, “In-Situ Measurement of Stress Relaxation Process in Hydrogenated Bulk Fe by Gamma-Ray Induced Positron Annihilation Spectroscopy,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **3149(1)**, 012018 (2025). DOI: 10.1088/1742-6596/3149/1/012018

Y. TAIRA, Y. OKANO and T. HIRADE, “Gamma-Ray-Induced Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy at UVSOR,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **3029(1)**, 012022 (2025). DOI: 10.1088/1742-6596/3029/1/012022

B-4) 招待講演

Y. TAIRA, “Development of gamma-ray-induced positron annihilation spectroscopy at UVSOR synchrotron facility,” 20th International Conference on Positron Annihilation (ICPA20), Takamatsu (Japan), June 2025.

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–).

学会誌編集委員

日本陽電子科学会会報編集委員 (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–.

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。さらに, PET 検出器を用いた欠陥分布のイメージング測定手法の開発にも取り組む。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。

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）
松田 博之（特任研究員）
新井 郁也（特任専門員）
大門 寛（研究員）
染井 裕貴（大学院生）
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と高度化
- 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，利用コミュニティの開拓と UVSOR の活性化

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特許化した。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，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（40–700 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。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や Ir の双晶成長，各種相転移・相分離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。新たに確立した顕微 ARPES/ARPES 顕微法の論文 (*J. Phys. Soc. Jpn.* 2022, *Rev. Sci. Instrum.* 2023) に続き Au 単結晶表面のスピン偏極電子状態の解明の論文 (*J. Phys. Soc. Jpn.*) 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

K. HAGIWARA, F. NISHINO, D. STELTER, J. PICKER, F. OTTO, R. SAGEHASHI, M. SCHAAL, J. BRANDHOFF, A. TURCHANIN, T. FRITZ, S. KERA and F. MATSUI, “Identifying Antiparallel Twin Domains of Monolayer WS₂/Au(111) by Momentum-Selected PEEM,” *Phys. Scr.* **101**(8), 085915 (2026). DOI: 10.1088/1402-4896/ae3cc8

E. HASHIMOTO, K. HAGIWARA, Y. ONUMA, H. KUROSAKA, Y. NISHIO, T. HAMAMATSU, H. YABE, T. WATANABE, F. MATSUI and S. KOH, “Domain Visualization of Molecular Beam Epitaxy-Grown Ir(111) Thin Films by Momentum-Selected Photoelectron Emission Microscopy,” *e-J. Surf. Sci. Nanotechnol.* **24**(1), 1–6 (2026). DOI: 10.1380/ejssnt.2026-001

F. MATSUI, K. HAGIWARA, Y. SATO, R. SAGEHASHI and S. SUGA, “Spin and Orbital Polarizations of Au(111) Surface State Determined by Photoelectron Momentum Microscope,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **94**, 114707 (9 Pages) (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.114707

B-3) 総説、著書

松井文彦, 豊島 遼 (編集幹事), 「X 線光電子分光法」, 日本表面真空学会編 (2025).

B-4) 招待講演

松井文彦, 「表示型光電子分光計測の研究系譜 放射光技術の発展史のなかで」, R026 先端計測の将来設計委員会研究会, 名古屋, 2025 年 8 月.

松井文彦,「多次元・複モード光電子分光計測:その目標とデータ解析技術に期待すること」,核融合研研究会,土岐市, 2025年6月.

佐藤祐輔,「光電子運動量顕微鏡:基礎から UVSOR での実例まで」,The Japan Society of Vacuum and Surface Science The 8th Young Members Section Meeting & Kanto Chapter 10th Anniversary Symposium,新潟県新潟市,2025年4月.

F. MATSUI,“Breaking the symmetry: a close look at crystal surface symmetry by photoelectron momentum microscope,” The 14th International Conference on Advanced Materials and Devices (ICAMD2025), Busan (Korea), December 2025.

F. MATSUI, “Mapping Electronic Phase Transition Domains and Spin-Polarized Bands at the Atomic Frontier with Photoelectron Momentum Microscopy,” Hybrid Quantum Systems and Nanotechnologies 2025 (HQSN2025), International Workshop on Hybrid Quantum Materials, Sciences, and Technologies 2025 (HQMST2025), Matsue (Japan), October 2025.

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–).

日本放射光学会評議員 (2025–2026).

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).

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–).

広島大学放射光科学研究所協議会委員 (2024–2026).

日本学術振興会 R073 先端計測技術の未来創生委員会運営委員及びWG リーダー (2025–2026).

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

東京理科大学, 非常勤講師, 2025年9月–2026年3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」(代表者; 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–).

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。運動量分布を一度に観測することで電子状態におけるキラリティや対称性の低下にいち早く気づくことができる利点がある。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。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(R073 先端計測分析技術), 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）

福田 亮平（特別共同利用研究員）
諫山 輝亮（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 ビームラインの自動測定開発と高精度化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) UVSOR BL5U において、高効率イメージスピン分解角度分解光電子分光（スピン ARPES）装置の開発を進めている。今年度は、昨年度開発したスピントーゲットの 2 軸モーター制御と測定プログラムを連動させた自動測定プログラムの開発に成功した。これにより、測定スピン方向の変更時に生じていた煩雑なパラメータ入力や PC を介したスピントーゲットのモーター駆動が完全自動化され、測定の簡便性が飛躍的に向上したことで、ユーザーからも高い評価を得ている。また、継続課題であった試料面直方向の電子レンズパラメータ調整も概ね完了し、現在は面直スピン検出の実証実験を実施中である。世界初となる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 ARPES 装置の実現に向け、いよいよ最終段階を迎えている。
- b) UVSOR BL7U において、三層系銅酸化物高温超伝導体 Bi2213 の角度分解光電子分光（ARPES）測定を実施した。アンダードープ試料において、内部の CuO_2 面におけるドーピング濃度が極めて低いにもかかわらず、アンチノード領域における d 波超伝導ギャップが 80 ～ 100 meV という前例のない大きさに増大していることを発見した。さらに、このギャップがフェルミアークを伴わず、「ノード金属」的な挙動を示すことを明らかにした。この特異な振る舞いは、最適ドープされた外側の CuO_2 面からの強い近接効果に起因すると考えられ、三層系銅酸化物がすべての多層系銅酸化物ファミリーの中で最も高い超伝導転移温度（ T_c ）を示す主要な要因であると結論付けた。本研究成果は *Nature Communications* 誌に掲載され、プレスリリースを実施した。
- c) 放射光ビームラインにおいて、高精度な実験や測定の自動化を実現するためには、励起光エネルギーとビームスポット位置の高い再現性が不可欠である。BL5U では励起光エネルギーの再現性が課題となっていたが、回折格子の角度制御における機械的挙動の問題を回避するため、特殊なモーター制御システムを開発・導入し、高い再現性の確保に成功した。同様の制御システムを BL7U にも展開し、初期段階では安定したものの、運用開始 1 年後に突如として再現性が低下する事象が発生した。エネルギー再現性は今後の自動測定システム構築における最重要要件であるため、現在、各光学素子制御の確認実験を行い、徹底的な要因究明を進めている。これと並行して、ビームライン全体の測定自動化も強力に推進している。これまでに、各種パラメータ（励起光エネルギー、試料角度、試料位置）に依存した自動

ARPES 測定, スピン分解 ARPES 測定の半自動化, Ar スパッタ・アニール処理の自動化, スピンターゲット製膜用の自動蒸着装置などを構築してきた。現在は「自動試料位置最適化機能」の実装が目前に迫っており, 来年度には, 一度清浄表面を作製して測定シーケンスを登録すれば, ビームタイム終了まで無人測定が可能な「全自動測定システム」の実装を予定している。長期的には, 試料の自動搬送機構と AI によるスペクトル判定技術を統合し, 薄膜試料等の最適な表面条件を完全自動で探索・導出する次世代型ビームラインシステムの構築を目指す。

B-1) 学術論文

S. IDETA, S. ADACHI, T. NOJI, S. YAMAGUCHI, N. SASAKI, S. ISHIDA, S. UCHIDA, T. FUJII, T. WATANABE, W. O. WANG, B. MORITZ, T. P. DEVEREAUX, M. ARITA, C. Y. MOU, T. YOSHIDA, K. TANAKA, T. K. LEE and A. FUJIMORI, “Proximity-Induced Nodal Metal in an Extremely Underdoped CuO₂ Plane in Triple-Layer Cuprates,” *Nat. Commun.* **16**(1), 9470 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-64492-x

D. GOTO, K. KUGA, K. TANAKA, T. TAKEUCHI and M. MATSUNAMI, “Evidence for Energy-Dependent Scattering Dominating Thermoelectricity in Heavy Fermion Systems,” *Appl. Phys. Lett.* **127**(16), 161903 (2025). DOI: 10.1063/5.0291138

K. SASAKI, H. MURAKAMI, K. KAMINAGA, F. TESHIMA, A. KIKUCHI, K. TANAKA, S. MARUYAMA and Y. MATSUMOTO, “Infrared Laser Deposition of High-Quality KBH₄ Epitaxial Thin Films as an Epitaxial Template for Heterostructures of Alkali Borohydrides,” *Cryst. Growth Des.* **25**(12), 4494–4502 (2025). DOI: 10.1021/acs.cgd.5c00396

T. KAWASAKI, A. NAGASE, K. HAYAKAWA, F. TESHIMA, K. TANAKA, H. ZEN, F. SHISHIKURA, N. SEI, T. SAKAI and Y. HAYAKAWA, “Infrared Free-Electron Laser: A Versatile Molecular Cutter for Analyzing Solid-State Biomacromolecules,” *ACS Omega* **10**(14), 13860–13867 (2025). DOI: 10.1021/acsomega.4c07531

T. KAWATE, H. A. SAKAUE, C. SUZUKI, N. NAKAMURA, K. TANAKA, E. NAKAMURA, K. FUJII, D. KATO, A. SASAKI and I. MURAKAMI, “Optical Design and Efficiency Measurement of an Extreme Ultraviolet High-Resolution Spectrometer for Unresolved Transition Array Research,” *Rev. Sci. Instrum.* **96**(4), 043512 (2025). DOI: 10.1063/5.0250066

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

スピン分解 ARPES 装置については, 自動化により利便性が飛躍的に向上した面内スピン測定に加え, 現在実証中の面直方向スピン検出を早期に確立する。これにより, 高効率かつ高分解能な全方位スピン分解 ARPES 装置を完成させ, 一般ユーザーへの本格的な共同利用を開始する。

また来年度は, 実装間近である自動試料位置最適化機能を導入し, 無人測定に向けた環境整備を進める。さらに AI によるスペクトル判定と試料自動搬送機構を統合した, 次世代自律測定システムの構築に向けた技術開発に着手する。

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) 軟X線分光顕微鏡と試料環境開発

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；クマムシの STXM 観察（ExCELLS 特別研究）；継続課題として、クマムシについて Scanning Transmission X-Ray Microscopy (STXM) による実験を行った。乾眠状態と活動状態のクマムシの超薄切片を作製し、炭素の K 吸収端の X 線吸収分光イメージングデータを取得・解析を行った。その結果、特徴的な化学種について、その分布様が乾眠と活動状態で異なることを見出した。

夾雑環境生体試料の定量化学状態マッピング；上記のクマムシもこのテーマに関わる研究テーマであるが、共同研究として STXM の顕微分光技術による「生体分子の絶対定量マッピングとその単離核への適用」にも引き続き参画した。

- b) 軟X線分光顕微鏡と試料環境開発；液体試料セルの開発；Liquid TEM のために開発されたマイクロ流路液体セルの導入に向けて、海外メーカーと協議した。現在、仕様を決定してプロトタイプの購入を進めている。

軟X線直接検出のための 2 次元検出器の導入；コヒーレントイメージングの一つである Ptychography や Resonant Soft X-Ray Scattering (RSoXS) の実現に向けて 2 次元検出器を入手し、その既存 STXM 装置への実装のための検討を行い、設計を進めている。

NanoXAS 装置の導入・立ち上げ；Swiss Light Source (SLS) から無償譲渡された NanoXAS は AFM と STXM を合わせた装置であり、同一試料を二つ手法で観察することが可能で、金属コートしたティップによる光電子収量検出を目指した装置である。3 月に搬入・据付を行い、4-5 月に共同研究者の Watts 博士の協力を得て、基本的な動作確認までを完了した。

STXM 測定制御系の更新計画；10 年以上経過した Windows XP 上の制御系の更新を目指して、SLS などの協力も得て、新制御システムへの移行への準備を行った。STXM の各種ステージについては全ての動作を確認出来た。

B-1) 学術論文

C. O. M. MARIANO, K. H. CHEN, J. SHIUE, H. YUZAWA, T. ARAKI, K. T. ARUL, C. L. DONG, T. Y. YUNG, S. C. HSU, X. CAI, S. H. HSIEH and C. H. CHUANG, “Hexagonal BN Membranes Formation by Liquid-Phase Synthesis: Insights from Scanning Transmission X-Ray Microscopy,” *APL Mater.* **13(10)**, 101118 (2025). DOI: 10.1063/5.0289068

T. A. KUMARAVELU, C.-L. PAN, H.-Y. HUANG, H.-W. CHANG, C.-H. LEE, T. T. T. NG, W.-C. CHOU, S.-C. HAW, T. ARAKI, T. OHGASHI and C.-L. DONG, “Heterostructured MnO₂/CuO on Cu Wire for Electrochemical Energy Storage: Insights from Spectro-Microscopy,” *Adv. Sustainable Syst.* **10(2)**, e00881 (2026). DOI: 10.1002/adsu.202500881

W.-T. CHEN, H. W. SHIU, Y.-X. CHEN, E. BATSAIKHAN, Y.-L. LAI, S. L. CHENG, T. ARAKI, J.-F. LEE, M. HAYASHI and Y.-J. HSU, “Highly Selective toward HER or CO₂RR by Regulating Cu Single and Dual Atoms on g-C₃N₄,” *Adv. Funct. Mater.* **36(10)**, e14183 (2026). DOI: 10.1002/adfm.202514183

R. L. JONES, J. R. HAWKINGS, M. P. MEREDITH, M. C. LOHAN, O. W. MOORE, R. M. SHERRELL, J. N. FITZSIMMONS, M. KAZEMIAN, T. ARAKI, B. KAULICH and A. L. ANNETT, “Antarctic Glaciers Export Carbon-Stabilised Iron(II)-Rich Particles to the Surface Southern Ocean,” *Nat. Commun.* **16(1)**, 5015 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-59981-y

B-4) 招待講演

荒木 暢, 「軟X線顕微分光法による生体分子・金属のラベルフリーマッピング」, 分子基盤研究部セミナー, 大府市, 2025年5月.

荒木 暢, 「Soft X-Ray Spectromicroscopy in Life Sciences at UVSOR」, 阪大生命機能研究科セミナー, 大阪, 2025年4月.

荒木 暢, 「Soft X-Ray Microscopy」, AOFSSR School 2025, つくば市, 2025年10月.

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 (2025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，多くの物性は系特有の構造に由来する。偏光顕微鏡などでは観察が困難な数 nm から数百 nm 程度の構造を調べる手法として，X線小角散乱法（SAXS）が用いられ，多くの成果を挙げている。しかしながら，SAXS は試料の電子密度変調には敏感であるものの，電子密度が近似した多成分系における特定成分の構造や，ねじれ構造などの観測は容易ではない。これに対し，X線共鳴過程を利用すれば，元素・分子種・分子配向に対して選択性を有する散乱強度を得ることが可能となる。ただし，ソフトマターの主成分である軽元素（炭素，窒素，酸素など）の共鳴エネルギーは 280 eV ～ 540 eV 程度の軟X線領域にあり，従来の SAXS で使用される 10 keV 程度の硬X線とはエネルギー域が大きく異なる。そこで我々は，軟X線領域の共鳴散乱を観測するための手法として「共鳴軟X線散乱法（RSoXS）」の開発を行っている。具体的には，分子科学研究所の UVSOR（BL3U）および放射光実験施設 Photon Factory（BL7A）において装置開発を進め，高分子や液晶の構造解析に適用してきた。本年度は，入射エネルギーを走査しながら散乱画像を取得するプログラムを開発した。これにより，炭素・窒素・酸素の K 殻吸収端を利用し，有機薄膜太陽電池のバルクヘテロジャンクション構造や，多成分有機薄膜の成分別解析，キラル液晶のモルフォロジー解析を実施した。また，Photon Factory（BL7A）では，軟X線検出器の回転機構を活用し，反射率測定による膜厚評価が可能なシステムを構築した。
- b) 軟X線を用いた生体試料内の元素および化学状態の可視化を実現すべく，密着型軟X線顕微鏡の開発を進めている。本手法では，シンチレーター上で細胞を培養し，厚さ 100 nm の Si_3N_4 メンブレンで封入した状態で軟X線を照射する。透過光像をシンチレーターによって可視光へ変換することで，細胞の XAFS イメージングを実現するものである。本年度は，ウシおよびトリの赤血球を対象として，試料内の鉄原子の分布計測に取り組んだ。具体的には，鉄の L 吸収端近傍の軟X線（700 ～ 740 eV）を用いて XAFS イメージング測定を実施した。鉄原子は炭素・窒素・酸素などの主要元素に比べると含有量は極めて少ないものの，鉄の L 吸収端における明瞭なスペクトルの取得に成功した。現在は，ピーク形状やピークエネルギーの解析から，鉄の価数状態に関する情報の抽出も進めている。
- c) X線自由電子レーザー施設「SACLA」の BL1 において，液体試料を対象とした実験装置の開発を進めている。本年度は，ネバダ大学の Craig Schwartz 氏らと共同で，液体表面からの二次高調波発生（SHG）に関する実験を行った。

一般に、液体表面などの界面では空間対称性が破れているため、二次高調波が発生しうる。この二次高調波を観測することで、表面に対して極めて敏感な測定が可能となる。特に液体表面（気液界面）は重要な反応場であり、その化学状態を特定する手法の確立は極めて重要である。さらに、軟X線の共鳴過程を利用することで、表面に存在する特定の元素の化学状態を選択的に観測できるという利点がある。本実験では、SACLA BL1 から照射される高強度の軟X線パルスを、ジメチルスルホキシド（DMSO）水溶液の超薄膜フラットジェットに照射した。その透過光および発生した二次高調波を、ビームライン下流に設置した斜入射分光器によって分光観測した。

B-1) 学術論文

H. IWAYAMA, H. YUZAWA and M. NAGASAKA, “Phase-Dependent Intermolecular Interactions of Nematic Liquid-Crystal Molecules Probed by Carbon K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Phys. Rev. E* **113**(1), 015413 (2026). DOI: 10.1103/17pr-b3wv

T. T. NGUYEN, T. HAYASHI, H. IWAYAMA and K. ISHIKAWA, “Valence Fragmentation Dynamics of a Promising Low Global Warming Etching Gas CF_3CHCF_2 ,” *Sci. Rep.* **15**(1), 9507 (2025). DOI: 10.1038/s41598-025-94119-6

T. KANEYASU, Y. HIKOSAKA, S. WADA, H. OTA, H. IWAYAMA, K. SHIMIZU, M. FUJIMOTO and M. KATOH, “Attosecond Interferometry Experiments at the Tandem Undulator Beamline BL1U of UVSOR-III Synchrotron,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **3010**(1), 012086 (2025). DOI: 10.1088/1742-6596/3010/1/012086

B-3) 総説、著書

A. -A. HAGHIGHIRAD, R. ICHIKAWA, T. MIYAMACHI, H. ISHII, S. AKAMATSU, E. MASUI, O. ISHIYAMA, H. IWAYAMA, E. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, E. INAMI and T. YAMADA, “STM Imaging and Electronic Correlation in van der Waals Ferromagnet Fe_3GeTe_2 ,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **64**(4), 040805 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/adc7be

B-4) 招待講演

岩山洋士, 「Study of Soft X-Ray Nonlinear Optical Effects Using Ultrathin Liquid Jet Sheets」, 第 39 回日本放射光学会, 仙台市, 2026 年 1 月.

H. IWAYAMA, “Development of Polymer Nanostructure and Chemical State Characterization Methods via Resonant Soft X-Ray Scattering and Reflectometry,” Optics & Photonics Japan, Tokushima, December 2025.

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–).

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～2026 年 3 月 31 日）*）

倉橋 直也（特任助教）

杉山 研嗣（特別共同利用研究員）

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

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) 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行っている。

B-1) 学術論文

J. YAHIRO, S. MITSUI, H. SHIMURA, K. OZAKI, M. NAKADA, M. KUNISU, N. KURAHASHI, H. KIUCHI and Y. HARADA, “Hydrogen-Bonded Structure Analysis of Water Molecules in the Subnanoscale Pores of Reverse Osmosis Membrane,” *Langmuir* **41**(45), 30160–30166 (2025). DOI: 10.1021/acs.langmuir.5c03228

Y. UEMURA, K. YAMAMOTO, Y. NIWA, T. BUTTIENS, H. ELNAGGAR, R. -P. WANG, M. LAZEMI, F. DE GROOT, T. KATAYAMA, M. YABASHI, C. J. MILNE and T. YOKOYAMA, “Electronic and Structural Relaxation of Photoexcited WO₃ Observed by Femtosecond Resonant X-Ray Emission Spectra,” *J. Phys. Chem. Lett.* **16**, 6138–6145 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.5c01062

T. FUJINO, M. HISHIDA, M. ITO, T. NAKAMURA, M. ASADA, N. KURAHASHI, H. KIUCHI, Y. HARADA, K. HARANO, R. MAKIURA, K. J. TAKENO, S. YOKOMORI, H. OIKE and H. MORI, “Macroscopic Structural Transition of Nickel Dithiolate Capsule with Uniaxial Magnetic Anisotropy in Water,” *Adv. Sci.* **12(29)**, 2504967 (2025). DOI: 10.1002/adv.202504967

S. NISHIMURA, N. KURAHASHI, S. SHIOMOTO, Y. HARADA and M. TANAKA, “Effects of Hydration Water on Bioresponsiveness of Polymer Interfaces Revealed by Analysis of Linear and Cyclic Polymer-Grafted Substrates,” *Soft Matter* **20**, 9454 (2024). DOI: 10.1039/D4SM00977K

B-3) 総説, 著書

A. -A. HAGHIGHIRAD, R. ICHIKAWA, T. MIYAMACHI, H. ISHII, S. AKAMATSU, E. MASUI, O. ISHIYAMA, H. IWAYAMA, E. NAKAMURA, T. YOKOYAMA, E. INAMI and T. YAMADA, “STM Imaging and Electronic Correlation in van der Waals Ferromagnet Fe_3GeTe_2 ,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **64(4)**, 040805 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/adc7be
横山利彦, 「XAFS の理論」, 「XAFS の基礎と応用」, 日本XAFS 研究会 (太田俊明, 朝倉清高, 畑田圭介, 朝倉博行, 片山真祥, 阿部 仁) 編, 講談社, 2 章, 1, 2, 4, 5 節, 9–23, 60–75 (2025).

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–).

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).

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。2023年8月16日に着任した前島尚行特任助教は2025年4月に立命館大に助教として転出した。また、2022年12月に着任した倉橋特任助教は2025年7月にQST NanoTerasuに転出した。2024年10月から2025年9月においては、X線自由電子レーザー SACLAにおいてフェムト秒時間分解X線発光分光・高分解能XAFSの開発とこれを用いた光触媒酸化タングステンのポーロン形成以前の電子励起状態の解析、ならびに、新報国マテリアル(株)との共同研究としてステンレスインバー合金の局所熱膨張に関する研究で成果が挙げられた。後者に関してはさらに関連研究を進めているところである。

＊) 2026年3月31日定年退職

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（特任助教）
高橋 翔太（特任助教）
佐藤 宏祐（特任助教）
瀬戸 啓介（特任研究員）
林 仲秋（特任研究員）
酒井広文（特別協力研究員）
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）
北山 拓（特別共同利用研究員）
吉村 凜士（特別共同利用研究員）
土居 篤史（特別共同利用研究員）
天野 里咲（特別共同利用研究員）
殿元 裕介（特別共同利用研究員）
榊原 隆之（技術支援員）
浦野 宏子（事務支援員）
大久保 麻由佳（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：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計測への応用
- d) 二次非線形極微分光法の開発と新奇ナノ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し，水素の生成やより高付加価値の分子への返還をエネルギー低消費型の温和な条件で実現する非熱的触媒技術は，持続可能な社会の実現に向けた重要課題である。一般に，酸化物光触媒に担持された金属助触媒は，光誘起電子を補足して還元反応（水素発生）を促進すると考えられてきた。これに対し，我々はメタン・水共存条件下でのオペランド分光により，金属助触媒そのものに注入された光誘起電子ではなく，酸化物と金属助触媒の間の複合界面，特に金属助触媒の縁部にトラップされた光誘起電子こそが高い反応活性を示すことを先駆的に明らかにし，さらに原子間力顕微鏡及びケルビンプローブ力顕微鏡を用いてその活

- 性電子の存在サイトを実空間で特定すること成功した [Sato *et al.*, submitted, *J. Am. Chem. Soc.* **146**, 24800 (2024)]。また、担持する金属種及び担持量に応じて、メタン・水混合系における完全酸化生成物・部分酸化生成物の選択性や反応カインेटクスが大きく変調されることを見出した。これは、「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 [Sato *et al.*, *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速度論的観点からさらに強く裏付ける成果である [Chem. Commun. **61**, 5942 (2025)]。さらに、近年注目される他の非熱的反応場として、直流電流印加触媒によるメタンドライリフォーミング反応にも着目し、オペランド赤外・可視・軟X線分光 (UVSOR) を先駆的に展開した。その結果、半導体エレクトロニクス (電子・正孔) と固体イオニクス (カチオン・アニオンレドックス) の物理が融合した新しい化学反応メカニズムを見出した [Sato *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett.* **16**, 12973 (2025)]。加えて、表面分子科学の観点からは、水酸基と分子状吸着水の存在量や水素結合状態を系統的に制御させたオペランド分光実験から、水酸基や強い水素結合ネットワークの存在が光触媒や直流電流印加触媒といった非熱的反応を阻害することを見出し、既存の元素戦略・材料戦略の限界を超えて水素発生反応の更なる活性向上を目指す「界面水エンジニアリング」の指針を提示・実証した [Lin *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett.*, submitted]。
- 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 高繰返しフェムト秒レーザーを基盤として、時間的に非対称なパルス波形制御とフェムト秒精度の遅延制御を導入した新しい“時間-周波数領域ハイブリッドコヒーレント界面非線形分光法”を開発した。本手法により、従来は電子共鳴やプラズモン共鳴を用いて信号増大しなければ観測が不可能であった表面吸着分子系のラマン振動モードを、汎用的かつ高感度に検出可能とした [T. Sugimoto *et al.*, *Nano Lett.*, submitted]。これにより、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.*, submitted, Seto *et al.*, in preparation, Takahara *et al.*, in preparation]。さらに、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-ピコ秒の超高速領域で系統的に制御することにより、アモルファス材料に特有のブロードで重なり合った振動スペクトルを一意的に成分分解する新たな解析法の開発に成功し、非晶質材料の微視的構造解析と構造機能関連の解明に新しい道を拓いた [特許出願 2025-144216, Yoshizawa *et al.*, in preparation]。さらに本手法をアモルファス氷 (H₂O・CO₂) に吸着した水素分子系の量子回転状態検出に発展させ、低次元束縛回転状態の直接観測に成功した [Oyamada *et al.*, in preparation, Furuya *et al.*, *Astrophys. J.* **1001**, 62 (2026)]。
- 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、空間反転対称性が界面に選択的な強力な計測法である。一方で、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内部の“埋もれた界面”には適用が難しいという本質的制約があった。この課題を克服するため、物質中透過に優れた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) し、それを第二高調波でコヒーレントにアップコンバートする四次非線形界面分光法を新たに開拓している [Kanai *et al.*, in preparation]。複数のフェムト秒パルスを用いる埋没界面の非線形分光においては、バルク物質由来の白色光の異常発生が界面信号観測の主要な妨害要因であったが、我々は相互位相変調効果に着目することでその妨害光の発生を抑制・制御する方法を新たに確立することに成功した [Kanai *et al.*, *Opt. Lett.* **50**, 7087 (2025)]。更に、空間分散を有する広帯域フェムト秒パルスを集光した際の波面回転現象を新たに非線形分光に導入することで、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電極材料系の界面を高感度に観測することに成功すると共に、電気化学条件下での界面状態変化をリアルタイムに捉えるオペランド観測にも成果に先駆けて成功した。これにより、電極の劣化挙動の解析から電極の高耐久性の付与指針の提示や、非自明な固液界面分子ダイナミクスを発見するに至った [Kin *et al.*, in preparation, Kanai *et al.*, in preparation, *CLEO/Europe-EQEC, Optica, EI-2.4*. (2025)]。

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、空間反転対称性が破れた表面界面系における極性分子凝集系の機能発現のカギを握る up/down 配向構造を光の回折限界を超えたナノ空間分解能で観測可能とする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成功した [Sakurai *et al.*, *Nano Lett.* **25**, 6390 (2025), Takahashi *et al.*, *J. Phys. Chem. C* **130**, 373–385 (2026), *Phys. Rev. Lett.* **134**, 206901 (2025)]. 更に、本手法の高度化として、STM の局所電場変調によりナノギャップ近接場和周波信号を飛躍的に増大する新技術を開発し [Takahashi *et al.*, *Nature Commun.* **17**, 2012 (2026)], 加えてフェムト秒時間分解能を有する局所位相敏感ダイナミクス計測法の構築 [Sakurai *et al.*, *J. Chem. Phys.* **164**, 074202 (2026), Featured Article], 及びより高次の非線形信号の探針増強検出に世界初で成功した [Sakurai *et al.*, in preparation]. また、従来困難と考えられていた Pt や Ni などの非プラズモニック基板表面上の分子系に対しても本探針増強分光が可能性であることを実証し [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], 探針先端ので生じる極限的な光電場増強現象を分子の量子状態制御へ応用する新しいナノフォトニクス研究にも着手すると共に [Takahashi *et al.*, in preparation], 通常の遠隔場分光では達成不可能であった高励起振動状態の生成にも成功した [Mochizuki *et al.*, submitted].

B-1) 学術論文

A. SAKURAI, S. TAKAHASHI, T. MOCHIZUKI, T. HIRANO, A. MORITA and T. SUGIMOTO, “Tip-Enhanced Sum Frequency Generation Spectroscopy Using Temporally Asymmetric Pulse for Detecting Weak Vibrational Signals,” *J. Chem. Phys.* **164**(7), 074202 (2026). DOI: 10.1063/5.0310824

S. TAKAHASHI, A. SAKURAI, T. MOCHIZUKI and T. SUGIMOTO, “Giant Near-Field Nonlinear Electrophotonic Effects in an Angstrom-Scale Plasmonic Junction,” *Nat. Commun.* **17**, 2012 (2026). DOI: 10.1038/s41467-026-68823-4

S. TAKAHASHI, K. KUMAGAI, A. SAKURAI, T. MOCHIZUKI, T. HIRANO, A. MORITA and T. SUGIMOTO, “Tip-Enhanced Sum-Frequency Vibrational Nanoscopy beyond the Diffraction Limit,” *J. Phys. Chem. C* **130**(1), 373–385 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c05411

T. KANAI, C. X. JIN, H. TSUNEKAWA, A. SAKURAI and T. SUGIMOTO, “Dramatic Enhancement of Supercontinuum Generation in H₂O by Non-Harmonic Two-Color Excitation,” *Opt. Lett.* **50**(22), 7087–7090 (2025). DOI: 10.1364/OL.575734

H. TEDZUKA, H. SAITO, N. MATSUMOTO, M. NAGASAKA, H. SATO, Y. SEKINE and T. SUGIMOTO, “Nonthermal Catalytic Origin in DC-Enhanced Dry Reforming of Methane Unveiled by Multimodal Operando Analyses,” *J. Phys. Chem. Lett.* **16**, 12973–12981 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.5c03159

A. SHIOTARI, S. LIU, G. TRENINS, T. SUGIMOTO, M. WOLF, M. ROSSI and T. KUMAGAI, “Picocavity-Enhanced Raman Spectroscopy of Physisorbed H₂ and D₂ Molecules,” *Phys. Rev. Lett.* **134**(20), 206901 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevLett.134.206901

A. SAKURAI, S. TAKAHASHI, T. MOCHIZUKI and T. SUGIMOTO, “Tip-Enhanced Sum Frequency Generation for Molecular Vibrational Nanospectroscopy,” *Nano Lett.* **25**(16), 6390–6398 (2025). DOI: 10.1021/acs.nanolett.4c06065

B-3) 総説、著書

T. SUGIMOTO, “Bridging Ideal Model Surfaces and Practical Material Surfaces: Unveiling Reaction Field of Photocatalytic Water-Splitting Hydrogen Evolution via Operando Infrared Spectroscopy,” *Vac. Surf. Sci.*, **68**(4), 218–225 (2025). DOI: 10.1380/vss.68.218 (in Japanese)

B-4) 招待講演

杉本敏樹,「次世代表面・界面科学の開拓に向けたオペランド分光の新展開・非線形分光計測の限界突破」, 東京大学物性研究所短期研究会「現代表面科学の到達点とフロンティアを超えて」, 柏, 2026年2月.

杉本敏樹,「非線形分子分光計測の限界突破:遠隔場から近接場へ」, 表面界面スペクトロスコピー, 湘南, 2025年12月.

櫻井敦教,「探針増強非線形分光の開発と和周波発生分光への挑戦」, 新領域開拓課題「一分子の科学」合同合宿セミナー, 長柄町, 2025年10月.

櫻井敦教,「探針増強非線形分光の開拓と振動和周波発生分光法への展開」, 第9回日本表面真空学会若手部会研究会, つくば, 2025年10月.

杉本敏樹,「非線形分子分光分析の限界突破:近接場和周波発生振動分光の新展開」, 日本分析化学会第74年会, 札幌市, 2025年9月.

杉本敏樹,「探針増強型近接場非線形分光の新展開:次世代界面分子観測と巨大非線形ナノエレクトロフォニクスの開拓」, 第28回プラズモニク化学シンポジウム, 東京, 2025年6月.

T. SUGIMOTO, “Innovations in Sum-Frequency Generation Vibrational Spectroscopy of Interfacial Molecular Systems: From Far-Field to Near-Field,” The 2nd International Symposium on Molecular Materials for Future International Workshop on Molecular Materials, Sendai (Japan), September 2025.

T. SUGIMOTO, “Advancing Second-Order Nonlinear Sum-Frequency Generation Vibrational Spectroscopy from Far-Field to Near-Field,” 15th Asia-Pacific Conference on Near-field Optics, Bali (Indonesia), August 2025.

T. SUGIMOTO, “Probing Interfacial Molecular Structures on Metal Surfaces: Advances in Sum-Frequency Generation from Far-Field to Near-Field,” The 82nd Okazaki Conference “Recent Advances and Perspectives of Interfacial Materials and Molecular Sciences Lead by Next-Generation Laser Techniques and Computational Science,” Okazaki (Japan), July 2025.

A. SAKURAI, “Tip-Enhanced Sum Frequency Generation for Detecting Weak Vibrational Signals Using a Temporally Asymmetric Pulse and Self-Heterodyne Detection,” Spins on Surfaces and Light-Matter Interaction—Satellite Workshop to STM’25, Seoul (Korea), July 2025.

B-6) 受賞, 表彰

櫻井敦教, 原子・分子・光科学 (AMO) 討論会第12回ポスター発表賞 (2025).

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–).

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–2027年3月.

理化学研究所, 客員研究員, 2021年4月–2027年3月. (櫻井敦教)

総合研究大学院大学先端学術院, 講義「基礎光科学」, 2025年7月–2025年10月.

B-10) 競争的資金

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アナログ分光」, 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).

科研費若手研究, 「オペランド分光計測に基づく光触媒表面反応の微視的理解と機能創出」, 斎藤 晃 (2025年度–2027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」(代表者: 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)」(代表者: 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).

科学技術振興機構経済安全保障重要技術育成プログラム(K Program)研究開発構想(個別研究型)「輸送機等の革新的な構造を実現する複合材料等の接着技術」, 「革新的軽量構造を実現する複合材接着技術に関する研究開発とその学理構築」(代表者: 岡部朋永), 杉本 敏樹(研究分担者) (2025年度–2030年度).

科学技術振興機構K Program(受託研究), 「in-situ 非線形分光による界面凝集構造評価」(代表者: 田中敬二), 杉本敏樹(研究分担者) (2025年度–2026年度).

C) 研究活動の課題と展望

これまで当研究室では, 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3つの課題に真正面から挑戦してきた。第一に, 「プラズモン共鳴や電子共鳴に依存せず, 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」, 第二に「光の回折限界を超えたナノスケール空間で表面・界面分子系を観測する極微非線形分光法の開発」, 第三に「オペランド分光法の開拓による光触媒微粒子をはじめとする複雑系・実材料系の表面界面分子科学の開拓」に取り組んできた。2018年5月の当研究室が発足以来, こ

れら3つの基軸に沿って進めてきた分野先導的研究は着実に成果として結実し、現在は、各分野においてさらなる飛躍につながる新現象の発見や新展開のフェーズに移りつつある。その進展は、競争的資金の獲得、国際的な成果発信、若手研究者の育成、共同研究の拡大という形で高いレベルで実を結んできている。

加えて、表面・界面分光分野における国際会議(岡崎コンファレンス)の企画・開催を通じて、国内外の第一線研究者と次世代研究者が集う議論と連携の場を形成し、日本発の研究潮流を発信する当該分野の拠点としての存在感を高めてきている。研究成果の創出にとどまらず、分野全体の発展を牽引する学術コミュニティ形成にも貢献している。今後は、これまで独立に発展・挑戦してきた上記3つの研究機軸をより高度に融合し、従来の実験手法で開拓が困難であった未踏の表面・界面領域や実材料・複雑系界面における新たな分子科学の創成を力強く推進する。また、こうした先端的計測研究を産学官の緊密な連携のもとで発展・応用し、「表面界面エンジニアリング」および「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・研究潮流を作り出す。これにより、環境・エネルギー分野をはじめとする人類社会が直面する重要課題の解決に貢献していく。

電子物性研究部門

清水 亮太（教授）（2025 年 4 月 1 日着任）

LUSTIKOVA, Jana（特任講師）

野田 彩加（事務支援員）

A-1) 専門領域：無機固体化学，表面・界面科学，固体電気化学，マテリアルズインフォマティクス

A-2) 研究課題：

- a) 金属水素化物における固体内水素の科学と荷電状態制御による新奇物性探索
- b) 薄膜モデル界面を用いた全固体電池の動作機構解明
- c) 実験自動・自律化による研究スタイルの革新

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 金属水素化物だけでなく，水素化物イオンに異種アニオンを複合した複合アニオン水素化物を薄膜状に非平衡合成し，その基礎学理構築と物性の探索を行っている。とりわけ，固体内の水素の荷電状態・結合状態に着目し，現時点で，光・熱による可逆的な物性変調を実現し，さらなる展開に向けて，電場や電気化学的な応答も含めた複合外場応答を探索している。
- b) 大気非曝露系における薄膜型全固体 Li 電池の作製と評価を進めてきたが，現在その対象をフッ化物イオン電池に拡張し，その動作機構の解明と電池特性の飛躍的な向上を目指している。電極・固体電解質の薄膜合成技術を確立し，多層膜化によるデバイス動作を進めている。
- c) 薄膜材料を対象とし，機械学習とロボット技術を組み合わせた「物質合成・評価・次の候補予測」のサイクルを自律的に繰り返す装置を開発してきた。現在は自動化の技術を拡張し，様々な評価系への導入と統合，新しい合成系の開発を進めている。

B-1) 学術論文

T. OZAWA, R. SHIMIZU, I. HARAYAMA, T. HITOSUGI, D. SEKIBA and K. FUKUTANI, “Observation of Proton Tunneling Correlated with Phonons and Electrons in Pd,” *Sci. Adv.* **11(47)**, 1–7 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.ady8495

C. ZHU, S. KOBAYASHI, Y. SUGISAWA, F. WEBER, K. H. LIN, M. KITAMURA, K. HORIBA, H. KUMIGASHIRA, K. NISHIO, R. SHIMIZU, D. SEKIBA, T. HITOSUGI and R. BERGER, “Space Charge Layer Evolution in All-Solid-State Batteries Probed via Operando Kelvin Probe Force Microscopy and Nuclear Reaction Analysis,” *ACS Nano* **19(45)**, 39062–39075 (2025). DOI: 10.1021/acsnano.5c10125

R. UEDA, T. SUDARE, R. SHIMIZU, K. NISHIO, R. NAKAYAMA, Y. MIURA, K. KANEKO, N. YAMADA and T. HITOSUGI, “Anatase TiO₂(112) Epitaxial Thin Films Grown by Mist Chemical Vapor Deposition,” *Cryst. Growth Des.* **25(21)**, 9086–9091 (2025). DOI: 10.1021/acs.cgd.5c00986

N. KISHI, S. SHINOHARA, Y. SUGISAWA, K. YAMAMOTO, S. KOBAYASHI, R. SHIMIZU, T. HITOSUGI and D. SEKIBA, “Application of $^7\text{Li}(p, \alpha)^4\text{He}$ NRA for Thin Film Type All-Solid-State Li Battery; Reinvestigation of $^7\text{Li}(p, \alpha)^4\text{He}$ Cross-Section and Optimization of Experimental Arrangement,” *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **566**, 165787 (2025). DOI: 10.1016/j.nimb.2025.165787

K. NISHIO, A. AIBA, K. TAKIHARA, Y. SUZUKI, R. NAKAYAMA, S. KOBAYASHI, A. ABE, H. BABA, S. KATAGIRI, K. OMOTO, K. ITO, R. SHIMIZU and T. HITOSUGI, “A Digital Laboratory with a Modular Measurement System and Standardized Data Format,” *Digital Discovery* **4**(7), 1734–1742 (2025). DOI: 10.1039/d4dd00326h

S. KOBAYASHI, N. ZETTSU, K. NISHIO, R. SHIMIZU, T. IMABORI, Y. SAITO, K. TESHIMA and T. HITOSUGI, “Solid Thin-Film Battery Using a Densely Packed $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ Crystal Layer,” *ACS Omega* **10**(16), 16073–16078 (2025). DOI: 10.1021/acsomega.4c09393

R. ZHENG, S. KOBAYASHI, M. OGAWA, H. KATSURAGAWA, Y. WATANABE, J. DENG, R. NAKAYAMA, K. NISHIO, R. SHIMIZU, Y. TATEYAMA, M. MORIYA and T. HITOSUGI, “Investigating the Interface of $\text{Li}\{\text{N}(\text{SO}_2\text{F})_2\}(\text{NCCH}_2\text{CH}_2\text{CN})_2$ Molecular Crystal Electrolytes for 5 V Class Solid-State Batteries,” *ACS Appl. Mater. Interfaces* **17**(14), 21951–21957 (2025). DOI: 10.1021/acsami.4c22076

T. SUDARE, H. XU, R. NAKAYAMA, R. UEDA, R. NAITO, R. SHIMIZU, Y. MIURA, K. KANEKO, N. YAMADA and T. HITOSUGI, “Extremely Low Electrical Contact Resistance at the Interface of Carbon-Fiber-Based Gas Diffusion Layer and Anatase TiO_2 Thin Films,” *ACS Appl. Electron. Mater.* **7**(7), 2785–2792 (2025). DOI: 10.1021/acsaelm.4c02236

B-3) 総説, 著書

安藤康伸, 清水亮太 (分担執筆), 「計測の自動化で拓ける世界」, 「走査プローブ顕微鏡／分光法 第2版 (表面分析技術選書)」, (公社) 日本表面真空学会編, 2.4章 (2025).

B-4) 招待講演

清水亮太, 「ラボオートメーションの動向と勘所～表面・真空関連の実例を交えて～」, 表面科学セミナー 2026 「実践！インフォマティクスと自律計測の基礎と応用」, 東京, 2026年3月.

清水亮太, 「物質科学における オートメーション・オートノマス型実験：現状とクラウドラボ化への展望」, 共創戦略統括本部企画「ラボオートメーションの現在と未来」, 岡崎, 2026年2月.

清水亮太, 「大学共同利用機関における AI・ロボット駆動型ラボシステムとは」, JAIMA-CORE 共催シンポジウム 2026, オンライン開催, 2026年2月.

清水亮太, 「化学のスマートラボ化：入門編」, CSJ 化学フェスタ 2025, 東京, 2025年10月.

R. SHIMIZU, “Hydrogen Charge-State Tuning in Metal-Hydride Thin Films and Application of an Autonomous Thin-Film Growth System,” TACT2025 International Thin Films Conference, Taipei (Taiwan), October 2025.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

データ駆動型材料科学研究会講師 (2026–2027).

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 R073 先端計測分析技術の未来創成委員会委員 (2025-).

次世代ナノプローブ技術委員会庶務幹事 (2023-).

理科教育活動

「科学三昧 in あいち 2025」指導助言 (2025).

その他

講演／パネルディスカッション「オートノマスラボトリ G の成果」JASIS (分析機器・科学技術総合展)2025「MEEP 公開シンポジウム」(2025).

B-10) 競争的資金

科研費学術変革領域研究(A),「イオン流の非平衡性と集団運動の理解による材料デザイン変革」(代表者:一杉太郎), 清水亮太(研究分担者)(2024年度-2028年度).

科研費学術変革領域研究(A),「イオン渋滞学に基づく新物質創製と機能開拓」(代表者:小林玄器), 清水亮太(研究分担者)(2024年度-2028年度).

科研費基盤研究(B),「エピタキシャルフッ化物薄膜電池のモデル界面を活用したフッ素の輸送機構解明」, 清水亮太(2022年度-2025年度).

科学技術振興機構革新的GX 技術創出事業(基金)(GteX 受託研究),「ハイスループット成膜装置の立ち上げ」(代表者:齋藤寛之), 清水亮太(研究分担者)(2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

2025年4月に着任し、新しくラボを立ち上げている。研究活動a) 水素化物関係においては、小スケールでも物質合成が可能であり物性探索を進めている。水素は電子数が極めて少ないためプローブするのが難しい元素であり、局所構造や結合状態の解明に向けては大規模施設利用における共同研究者との連携を進めている。研究活動b) フッ化物イオン電池においては、大気非曝露が大原則であり、試料の搬送システムやデバイスのパターニングなどを一から再構築している。湊丈俊主任研究員と所内連携を進めており、電池の評価系の構築や、走査型プローブ顕微鏡を駆使した電極反応のin-situ 微視的観察を進める予定である。研究活動c) 実験自動・自律化においては、共同研究先となる他機関の大型設備の開発に参画しており、水素吸蔵材料等のハイスループット探索を進めている。自動化が進むことで、原材料を莫大に消費することにも直面しており、少量の原料による大規模実験が可能な合成・評価系の構築を今後進めなければならない。

取り扱う物質系や評価系は大気環境では安定に存在できないものも多く、真空やグローブボックス環境などによる操作を必要とするものが大半である。このことは、直接的な実験操作ではなく、間接的あるいは遠隔的な実験操作が多いことも意味しており、自動化プロセスを導入する契機であると考えている。実験規模に見合ったコストによるプロセスの自動化と、各操作をシームレスに接続した「ボトルネックのない全自動化」を目指す。

篠北 啓介（准教授）（2025 年 1 月 1 日着任）

坂田 諒一（助教）

呉 柊斗（大学院生）

野田 彩加（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) 原子層ナノ材料の精密作製技術をさらに発展させた。PPC や PVC などのポリマーを用いた積層技術を新たに確立し，試料作製の精度と再現性を大幅に向上させた。また，SHG マッピング測定に偏光測定機能を追加し，試料の対称性評価の高度化を実現した。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，原子層材料への分子吸着手法を習得し，対称性制御の新たなアプローチを確立した。さらに，メゾスコピック計測研究センターの熊谷崇准教授グループに高品質な試料を提供し，共同研究を推進した。加えて，クリーンルームにおけるナノ構造のシリコン基板上への作製技術を確立し，ナノ構造と原子層材料を組み合わせた研究の基盤を整えた。
- b) シリコンナノ球と原子層材料を組み合わせたハイブリッド構造の SHG 特性を明らかにした。さらに，シリコンナノ球をヘテロ構造に応用し，新たな光学特性の開拓を進めている。また，分子を吸着させた二層遷移金属ダイカルコゲナイド試料の光学測定を行い，分子吸着によって反転対称性が破れ，光学応答が大幅に変化することを見出した。この結果は，分子吸着による対称性制御が非線形光学応答の制御に有効であることを示しており，新たな光機能創出への道を拓くものである。

B-1) 学術論文

S. ASADA, K. SHINOKITA, K. WATANABE, T. TANIGUCHI and K. MATSUDA, “Nonlinear Photovoltaic Effects in Monolayer Semiconductor and Layered Magnetic Material Hetero-Interface with P- and T-Symmetry Broken System,” *Nat. Commun.* **16**(1), 4827 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-58918-9

F. YANG, W. IDEHARA, K. TANAKA, K. SHINOKITA, H. ZHAO and K. MATSUDA, “Autonomous Robotic Mechanical Exfoliation of Two-Dimensional Semiconductors Combined with Bayesian Optimization,” *ACS Nano* **19**(45), 39005–39013 (2025). DOI: 10.1021/acsnano.5c08516

H. WANG, K. SHINOKITA, K. WATANABE, T. TANIGUCHI, S. KONABE and K. MATSUDA, “Direct Identification of Valley Coherence and Its Manipulation in Monolayer Two-Dimensional Semiconductor,” *ACS Nano* **19**(23), 21484–21491 (2025). DOI: 10.1021/acsnano.5c02659

Y. XIANG, K. SHINOKITA, K. WATANABE, T. TANIGUCHI and K. MATSUDA, “Magnetic Brightening and Its Dynamics of Defect-Localized Exciton Emission in Monolayer Two-Dimensional Semiconductor,” *Sci. Adv.* **11**(23), eadr5562 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.adr5562

D. MURASE, K. SHINOKITA, Y. WAKAFUJI, M. ONODERA, T. MACHIDA, K. WATANABE, T. TANIGUCHI, J. BI, Z. ZHOU, S. ZHAO and K. MATSUDA, “All Dry Transfer Processes Utilizing Au Exfoliation for Predetermined Shapes of Transition Metal Dichalcogenide,” *Langmuir* **41(16)**, 10099–10107 (2025). DOI: 10.1021/acs.langmuir.4c04629

B-4) 招待講演

篠北啓介, 「ナノ構造制御で拓く原子層半導体の光科学」, 2025年度日本分光学会北海道支部シンポジウム, 北海道大学, 札幌, 2026年3月.

篠北啓介, 「二次元半導体の光機能制御: モアレ励起子からナノフォトニクス増強」, 2025年度「一分子の科学」研究会, 理化学研究所鈴木梅太郎記念ホール, 和光, 2026年2月.

篠北啓介, 「ファンデルワールスエンジニアリングによる二次元半導体の光機能制御」, 日本物理学会第80回年次大会, 東広島, 2025年9月.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第38回マイクロプロセス・ナノテクノロジー国際会議(MNC2025)論文委員会委員(2025).

理科教育活動

出前授業「進路講演会」愛知県立岡崎北高等学校(2025). (坂田諒一)

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–2025年度).

科研費基盤研究(B), 「モアレ超構造による双極子集団制御と新規量子光学現象の開拓」, 篠北啓介(2025年度–2027年度).

C) 研究活動の課題と展望

- a) これまでに確立した積層技術と分子吸着手法をさらに発展させ, 原子層ヘテロ構造の対称性をより精密に制御する技術の構築を目指す。特に, 分子吸着による反転対称性の制御を体系的に理解し, モアレ周期と対称性を設計した構造の創製に取り組む。また, クリーンルームで確立したナノ構造作製技術を活かし, シリコンナノ構造と原子層材料を組み合わせた新たなハイブリッド構造の作製手法を開拓する。
- b) ナノ構造と遷移金属ダイカルコゲナイドを組み合わせ, 従来にない光学応答の発現を目指す。シリコンナノ構造による光の閉じ込め効果を活用した非線形光学応答の増強に取り組むとともに, 分子吸着による対称性制御を非線形光学測定と組み合わせ, 対称性の破れに起因する新奇な光物性の探索を進める。これらを通じて, 原子層材料を基盤とした新たな光機能の創出につなげる。

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) 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
- b) マジック角試料回転下での新規同種核間磁気双極子相互作用リカップリング法の開発
- c) 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) 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ている。昨年度までとは異なり，オフレゾナンス照射に基づく既存の ^1H 同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法に関して，位相変調を適用したモジュールを組み合わせたスーパーサイクルにより，既存の同手法の問題点であったオフセット依存的不完全性の消去を実現した。
- b) ^{13}C 核のような希薄核に関して，連続的に位相変調させた低出力パルスを高速 MAS 下で回転周期に同期して照射することにより，同種核間磁気双極子相互作用をリカップリングする新規手法の開発を行い，理論的計算まで完了した。
- c) 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ンングモジュールを開発してきた。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。昨年度開発を開始した 2.5mm 試料管用独自スピニングモジュールの最適化と並行して，1.9mm 試料管用独自スピニングモジュールの開発を行った。昨年同様，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。

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 の回転モジュールの開発をほぼ完了し，最適化中である。今後 1.9mm，および 1.3mm の試料管，さらに 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、国際共同研究を開始したが、国際共同研究代表者の他機関への転出により中止を余儀なくされた。2025年度に入り国内共同研究先を確保した。

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本年度はこのサイバー攻撃に用いられている無線電波（同定、解析済み）を遮断するシールドルームを導入した。3日間にわたる作業の最終日に業者と西村双方で性能検証の測定をしたが、室内で3.152 GHzの強い電波が双方の機器で観測された。この為、シールドルーム内への盗聴、盗撮機器の設置、またはシールドルームの一部破壊のどちらかが疑われた。この行為には入室が必要であり、監視カメラの録画映像の改ざんが必要である。同ファイルの専門家による解析により、これまでの犯罪行為の存在も含めて明らかになると期待している。

4-7 生命・錯体分子科学研究領域

生体分子機能研究部門

加藤 晃一（教授）（2008 年 4 月 1 日着任）

立尾 清悟（特任助教）

林 成一郎（特任研究員（IMS フェロー））

矢木 真穂（特別訪問研究員）

谷中 冴子（特別訪問研究員）

沈 晋補（特別共同利用研究員）

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）

米山 樹（特別共同利用研究員）

梶田 大起（特別共同利用研究員）

高木 励（特別共同利用研究員）

近藤 幸子（特任専門員）

磯野 裕貴子（技術支援員）

新美 しおり（技術支援員）

上條 真弘（技術支援員（派遣））

穂積 知佳子（技術支援員（派遣））

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) 生命が多様な機能を発現する背景には、分子間相互作用や化学修飾によって形成される動的な分子秩序が存在する。本研究グループでは、このような生命分子の「動秩序」がどのように創発し生体機能を支えているのかを明らかにすることを目的として研究を推進した。本年度は特に、糖鎖修飾および抗体分子を中心とする糖タンパク質の構造ダイナミクスに着目し、NMR 分光法、質量分析、分子動力学シミュレーションなどを統合した解析を進めた。抗体 IgG の Fc 領域に関する研究では、糖鎖構造の違いが抗体の構造ダイナミクスおよび免疫エフェクター機能に与える影響を解析した。安定同位体標識 NMR 分光法と分子動力学シミュレーションを組み合わせた解析により、Fc 糖鎖のガラクトシル化が C_{H2} ドメインの構造安定性を高め、Fcγ 受容体や補体系タンパク質との相互作用に関わる分子ダイナミクスを制御することを明らかにした。また、IgG1 Fc 領域のメチル基 NMR シグナルの部位特異的帰属を確立するとともに、天然同位体存在比の抗体試料にも適用可能な NMR 解析基盤を構築した。さらに、メチオニン酸

化に伴う局所構造変化を NMR と質量分析の統合解析により残基レベルで解明し、抗体医薬の高次構造評価および品質管理に資する分析手法を提示した。抗体分子の構造形成機構に関する研究として、IgG1 ヒンジ領域の構造機能解析も進めた。ヒンジ領域の Pro230 残基の欠失により重鎖間相互作用が失われ、半分子抗体 (half-IgG) が形成されることを見出し、この構造変化の分子機構と Fcγ 受容体依存的機能への影響を明らかにした。これらの成果は、抗体分子の柔軟な構造制御機構の理解と次世代抗体医薬設計の基盤となるものである。糖鎖の構造ダイナミクスに関しては、分子動力学シミュレーションと NMR 分光法を組み合わせた解析を行い、糖鎖のコンフォメーション変化を支配する分子内相互作用を明らかにした。さらに非線形相関解析を導入することにより、グリコシド結合の二面角や水素結合ネットワークが糖鎖構造の動的安定性に与える影響を定量的に解析し、糖鎖機能の分子基盤となる構造ダイナミクスの理解を進めた。また、モデル生物として広く用いられるラットを対象として血清糖タンパク質の網羅的グライコミクス解析を行い、血清 N-グリカン構造の時間変動および性差を明らかにした。特に O-アセチル化シアル酸を含む特徴的な糖鎖構造が存在することを示すとともに、グライコプロテオミクス解析によりこれらの糖鎖を担う糖タンパク質群を同定し、生理条件による糖鎖動態の変化に関する基盤データを提供した。さらに、細胞内オルガネラの構造と分子局在を三次元的に解析するため、免疫電子顕微鏡法と連続切片走査電子顕微鏡を組み合わせた三次元免疫電子顕微鏡法を開発した。本手法によりゴルジ体マトリックスタンパク質の三次元局在を可視化し、オルガネラ構造と分子分布を統合的に解析するための新しい手法基盤を確立した。加えて、国内外の共同研究を通じて糖鎖や糖タンパク質の機能解析を推進し、以下の成果を得た。

- ①配位ケージの内部空間を利用して糖鎖がタンパク質活性部位に結合する現象を明らかにし、分子空間による糖鎖認識制御の新しい概念を提示した。
- ②酵素的プレニル化反応を利用して抗菌ペプチドの化学空間を拡張する手法を開発し、生理活性ペプチドの機能改変の可能性を示した。
- ③糖鎖硫酸化酵素欠損マウスを用いた研究により、脊髄損傷後の運動機能回復に糖鎖修飾が関与することを明らかにした。

以上の研究により、糖鎖修飾や化学修飾、タンパク質間相互作用によって形成される生命分子の動的秩序の理解が進展するとともに、生命分子ネットワークが創発する高次機能の分子基盤の解明が進んだ。

- b) 生命が極限環境においてどのように存続し機能しうるのかという根源的な問いに迫ることを目的として、極限環境において生命活動を司る分子集団の構造・動態・機能の解析を進めた。本年度は特に、糖鎖修飾およびタンパク質集合体形成に着目し、極限環境生物、微生物、さらに巨大ウイルスを対象として、生命分子の構造多様性と適応機構の解明に取り組んだ。クマムシの乾眠に関連する糖鎖修飾の研究では、N 型糖鎖を対象とした網羅的なグライコミクス解析により、クマムシにおいて paucimannose 型糖鎖が主要な糖鎖構造として存在することを明らかにした。さらに、非還元末端に Fucα1,3-GlcNAc を有する特徴的な糖鎖構造を同定し、これらの糖鎖修飾が酸化ストレス防御や細胞外マトリックス関連タンパク質に付加されていることを示した。これらの結果は、極限環境耐性に関わる分子機構において糖鎖修飾が重要な役割を果たしている可能性を示唆するものである。また、アンモニア酸化古細菌 *Nitrososphaerota* に関する研究では、グライコプロテオミクス解析を通じて、S-layer タンパク質を中心とした N 型糖鎖の全体像を明らかにした。その結果、キトビオースコアを有する新規 N-グリカン構造を同定するとともに、近縁種間で糖鎖修飾様式が大きく異なることを見出し、極限環境微生物の細胞表層構造の多様性と環境適応機構に関する新たな知見を得た。さらに、巨大ウイルスの糖鎖修飾機構の解明を目的として、*Mimiviridae* および *Marseilleviridae* に属するウイルスの比較グライコミクス解析を行った。その結果、これらの巨大ウイルスは宿主の分

泌経路に依存した *N* 型糖鎖修飾システムに依存するのではなく、独自の糖鎖生合成機構を利用して系統特異的な *O* 型糖鎖を形成していることを明らかにし、ウイルス糖鎖の進化的多様性に関する新たな知見を提示した。加えて、国際宇宙ステーションにおける微小重力環境を利用したタンパク質集合体形成研究を行い、家族性アルツハイマー病関連変異体である Tottori 型 A β の線維形成過程を解析した。その結果、微小重力条件下ではアモルファス凝集体の形成が抑制され、構造解析に適した線維が形成されることを見出した。クライオ電子顕微鏡解析により複数のプロトマー構造を有する線維構造を決定し、アミロイド線維形成の自由エネルギー景観の理解に新たな知見をもたらした。これらの研究により、極限環境において生命活動を支える分子集団の構造と機能に関する理解が進展するとともに、生命分子の適応機構や進化的多様性を理解するための基盤的知見が得られた。

B-1) 学術論文

S. YANAKA*, Y. KOSEKI, Y. MIYANOIRI, T. YAMAZAKI, T. TERAUCHI, D. KANEKO, Y. ISONO, K. TOMITA, S. KONDO, M. ONITSUKA, M. YAGI-UTSUMI, H. YAGI, A. ISHII-WATABE and K. KATO*, “Unlabeled NMR Approach with Site-Specific Methyl Assignments for Structural Evaluation of the IgG1 Fc Region,” *J. Am. Chem. Soc.* **148**(8), 8374–8382 (2026). DOI: 10.1021/jacs.5c18997

M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, N. HASHII, K. TOMITA, T. MISAWA, Y. DEMIZU, A. ISHII-WATABE and K. KATO, “Stereochemical and Structural Characterization of Methionine Oxidation in the IgG1 Fc Region by Integrated NMR and LC-MS Analysis,” *Anal. Chem.* **98**(7), 5316–5322 (2026). DOI: 10.1021/acs.analchem.5c06092

D. KOGA, S. KUSUMI, H. YAGI and K. KATO, “A novel 3D Immuno-Electron Microscopy and Its Application to the Golgi Apparatus,” *Biomed. Res.* **47**, 25–34 (2026). DOI: 10.2220/biomedres.47.25

Y. KOSEKI, Y. YAMAGUCHI, M. AOYAMA, K. HIRAKA, M. TADA, A. KODAMA, A. SENOO, A. ISHII-WATABE, T. UCHIHASHI, K. MURATA, S. UCHIYAMA, K. KATO, S. YANAKA and J. M. M. CAAVEIRO, “Key Role of Pro230 in the Hinge Region on the Architecture and Function of IgG1,” *J. Med. Chem.* **69**, 3902–3914 (2026). DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5c02419

J. SHIM, C. HOZUMI, M. KUROGOCHI, M. YAGI-UTSUMI, J. FURUKAWA, M. TAKEMURA, H. YAGI and K. KATO, “Comparative Glycomic Analysis of Mimiviridae and Marseilleviridae Uncovers Host-Related and Lineage-Specific Glycosylation,” *J. Biochem.* **179**, 117–126 (2025). DOI: 10.1093/jb/mvaf072

M. MOROZUMI, T. OZAKI, K. NISHITSUJI, Y. TAKEDA-UCHIMURA, A. MATSUMOTO, S. ITO, S. IMAGAMA, N. ISHIGURO, H. YAGI, K. KATO, T. O. AKAMA, T. KOSUGI, S. MARUYAMA, K. KADOMATSU, S. D. ROSEN, L. J. NOBLE-HAEUSSLEIN and K. UCHIMURA, “Enhanced Locomotor Recovery in Mice Lacking GlcNAc6ST1 and GlcNAc6ST4 Following Spinal Cord Injury,” *Life Sci. Alliance* **8**, e202503469 (2025). DOI: 10.26508/lsa.202503469

S. YANAKA, Y. SAKAE, Y. MIYANOIRI, T. YAMAGUCHI, Y. ISONO, S. KONDO, M. IWASAKI, M. ONITSUKAH, H. YAGI and K. KATO, “Exploring Glycoform-Dependent Dynamic Modulations in Human Immunoglobulin G *via* Computational and Experimental Approaches,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **122**, e2505473122 (2025). DOI: 10.1073/pnas.2505473122

H. YAGI, S. KONDO, R. MURAKAMI, R. YOGO, S. YANAKA, F. UMEZAWA, M. YAGI-UTSUMI, A. FUJITA, M. OKINA, Y. HASHIMOTO, Y. HOTTA, Y. KATO, K. NAKAJIMA, J. FURUKAWA and K. KATO, “Temporal and Sex-Dependent *N*-Glycosylation Dynamics in Rat Serum,” *Int. J. Mol. Sci.* **26**(15), 7266 (2025). DOI: 10.3390/ijms26157266

- H. OZAWA, A. MIYATA, S. HAYASHI, N. MIYOSHI, K. KATO, S. ITO and D. FUJINAMI**, “Expanding the Chemical Space of Antimicrobial Peptides via Enzymatic Prenylation,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(29), 25642–25651 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c06850
- M. YAGI-UTSUMI, S. YANAKA, R. N. BURTON-SMITH, C. SONG, C. GANSER, C. YAMAZAKI, H. KASAHARA, T. SHIMAZU, T. UCHIHASHI, K. MURATA and K. KATO**, “Microgravity-Assisted Exploration of the Conformational Space of Amyloid β Affected by Tottori-Type Familial Mutation D7N,” *ACS Chem. Neurosci.* **16**(14), 2682–2690 (2025). DOI: 10.1021/acschemneuro.5c00217
- K. KATO, T. WATANABE and T. YAMAGUCHI**, “Deciphering Glycan Dynamics through Nonlinear Correlation Analysis,” *Chem. Pharm. Bull.* **73**(7), 639–644 (2025). DOI: 10.1248/cpb.c25-00243
- H. YAGI, T. SAITO, S. Y. GUU, N. YAMAKAWA, S. SHIMAMURA, S. KONDO, M. YAGI-UTSUMI, K. TAKAI, J. FURUKAWA, Y. GUÉRARDEL, K. H. KHOO, K. ARAKAWA and K. KATO**, “Uncommon *N*-Glycan Structures in Anhydrobiotic Tardigrades,” *Mol. Cell. Proteomics* **24**(6), 100979 (2025). DOI: 10.1016/j.mcpro.2025.100979
- S. NAKAGAWA, H. YAGI, T. SUYAMA, S. SHIMAMURA, S. YANAKA, M. YAGI-UTSUMI, S. KATO, M. OHKUMA, K. KATO and K. TAKAI**, “Exploring Protein *N*-Glycosylation in Ammonia-Oxidizing *Nitrososphaerota archaea* through Glycoproteomic Analysis,” *mBio* **16**(6), e03859-24 (2025). DOI: 10.1128/mbio.03859-24
- T. NAKAMA, M. TADOKORO, R. EBIHARA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and M. FUJITA**, “Proximity-Induced Saccharide Binding to a Protein’s Active Site within a Confined Cavity of Coordination Cages,” *Chem. Sci.* **16**(23), 10549–10554 (2025). DOI: 10.1039/d5sc00782h
- A. KUMAGAI, K. MAYANAGI, S. HAYASHI, S. NAKANO, S. ITO and D. FUJINAMI**, “In Vitro Amyloid Formation by a Bacteriocin From *Bifidobacterium longum* subsp. *infantis*,” *Proteins: Struct., Funct., Bioinf.* **93**(11), 1953–1961 (2025). DOI: 10.1002/prot.70002
- D. KOHDA, S. HAYASHI, K. FURUITA and C. KOJIMA**, “Projected Volume Method for Accurate Measurement of Cross-Peak Intensity in Two-Dimensional NMR Spectra,” *Magn. Reson. Chem.* **64**(6), 555–567 (2026). DOI: 10.1002/mrc.70095

B-3) 総説、著書

- 加藤晃一, 木川隆則, 「AI for Science 時代における NMR 研究基盤の再構築」, *Bulletin of the Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan*, **15**, 93–98 (2026).
- H. YAGI, S. TATEO and K. KATO**, “Regulation of Glycan Modification by Glycosyltransferases in the Golgi Apparatus,” in *The Golgi Network II*, A. Nakano and J. Saraste, Eds., Subcellular Biochemistry, Springer (Cham), **111**, 251–267 (2026). DOI: 10.1007/978-3-032-16833-7_11
- 加藤晃一, 「糖鎖のコンフォメーション解析(1)」, 未来を創るグライコサイエンス——我が国のロードマップ 2025——(日本糖鎖科学コンソーシアム (JCGG) 編), 248–250 (2026).
- 加藤晃一, 藤田盛久, 矢木宏和, 立尾清悟, 山崎貴大, 木塚康彦, 「糖鎖生合成アトラス」, *細胞*, **57**, 925–929 (2025).
- H. YAGI, S. KONDO and K. KATO**, “Structural Analysis of Glycans Based on HPLC Mapping,” *Glycoforum* **28**, A18 (2025). DOI: 10.32285/glycoforum.28A18
- K. KATO, S. YANAKA and T. YAMAGUCHI**, “The Synergy of Experimental and Computational Approaches for Visualizing Glycoprotein Dynamics: Exploring Order within the Apparent Disorder of Glycan Conformational Ensembles,” *Curr. Opin. Struct. Biol.* **92**, 103049 (2025). DOI: 10.1016/j.sbi.2025.103049

K. KATO, S. YANAKA and H. YAGI, “Glycoprotein Preparation by Heterologous Expression,” in *Methods in Molecular Biology, NMR of Glycoproteins*, J. Jiménez-Barbero and O. Millet, Eds., Humana, New York, **2961**, 53–67 (2025). DOI: 10.1007/978-1-0716-4722-6_4

B-4) 招待講演

加藤晃一, 「ゴルジアトラスに基づく糖鎖修飾プログラムの解説」, 第 666 回難研セミナー 第 244 回難治疾患共同研究拠点セミナー 第 4 回学際領域展開ハブ形成プログラムセミナー, 東京, 2025 年 12 月.

矢木真穂, 「タンパク質の配置を自在にデザインしたい!」, 第 1 回生体分子設計研究会, 東京, 2025 年 12 月.

谷中冴子, 「抗体分子の柔構造に学ぶ『柔らかさ』が拓く機能デザイン」, 第 1 回生体分子設計研究会, 東京, 2025 年 12 月.

矢木真穂, 「クマムシ由来 CAHS1 による非膜オルガネラ形成と乾燥耐性機構の構造・機能的理解」, 第 48 回日本分子生物学会年会, 横浜, 2025 年 12 月.

矢木真穂, 「アミロイド β タンパク質の線維形成の分子機構」, 大阪大学蛋白質研究所セミナー, 吹田, 2025 年 12 月.

加藤晃一, 「構造糖鎖生物学の探究: NMR 分光法と計算科学の統合による抗体機能の解明」, 日本分光学会 NMR 分光部会「集中講義」, 東京, 2025 年 10 月.

矢木真穂, 「動的溶液環境におけるアミロイド β タンパク質の分子集合」, 第 63 回日本生物物理学会年会, 奈良, 2025 年 9 月.

加藤晃一, 矢木宏和, 「血液凝固因子の分泌を司るパスポート配列のバイオ医薬生産への応用可能性」, 第 25 回日本蛋白質科学会年会, 姫路, 2025 年 6 月.

谷中冴子, 加藤晃一, 「NMR を用いた血清環境における抗体の相互作用解析」, 第 25 回蛋白質科学会年会, 姫路, 2025 年 6 月.

S. YANAKA and K. KATO, “The Role of Glycans in Antibody Function: Structural Dynamics and Functional Implications,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), Honolulu (USA), December 2025.

K. KATO, M. YAGI-UTSUMI and S. YANAKA, “Advancing glycoprotein structural analysis: Integrating NMR and computational approaches for therapeutic antibodies,” Pacifichem 2025, Honolulu (USA), December 2025.

M. YAGI-UTSUMI, S. G. ITOH, H. OKUMURA, K. YANAGISAWA, K. KATO and K. NISHIMURA, “Double-layered structure of amyloid- β assemblage on GM1 clusters: A catalytic platform for fibrillization in Alzheimer’s disease,” Pacifichem 2025, Honolulu (USA), December 2025.

K. KATO, “Exploring the Golgi landscape to decipher the glycosylation program,” International Symposium on Cellular biology, Tokyo (Japan), September 2025.

K. KATO, “Toward Deciphering the Blueprint of Protein Glycosylation: From Molecular Dynamics to the Sub-Golgi Landscape,” AMED International Symposium “Proteostasis in Biology and Medicine,” Kyoto (Japan), August 2025.

K. KATO, “Modulating Glycan Dynamics to Enhance Molecular Recognition and Therapeutic Potential,” 40th Biennial Meeting of the Spanish Royal Society of Chemistry, Bilbao (Spain), July 2025.

K. KATO, “Decoding Glycan-Driven Dynamics in Antibodies: NMR-Based Structural Insights into Therapeutic Glycoproteins,” Joint meeting of 11th Asia Pacific NMR (APNMR) & 30th National Magnetic Resonance Society (NMRS), Pune (India), June 2025.

K. KATO, S. YANAKA and M. YAGI-UTSUMI, “Computational and experimental approaches for antibody dynamics and interactions with amyloid fibrils,” Korea-Japan International Symposium on Protein Science, Himeji (Japan), June 2025.

B-6) 受賞, 表彰

加藤晃一, 日本薬学会 2026 年度日本薬学会賞 (2026).

Shim Jinbo, 矢木宏和, 黒河内政樹, 矢木真穂, 古川潤一, 武村政春, 加藤晃一, 第 26 回日本糖質学会ポスター賞 (2025).

矢木真穂, 第 6 回日本核磁気共鳴学会進歩賞 (2025).

西崎竜平, 令和 7 年度日本生化学会中部支部支部長賞 (2026).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本バイオイメーシング学会評議員 (1995–), 理事 (2012–), 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 (2013–2025), 監事 (2025–).

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–), 執行役員 (2024–).

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–).

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 (2023–2029).

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–).

京都大学エネルギー理工学研究所在り方検討委員会委員 (2025–2026).

学会誌編集委員

Glycoconjugate Journal, Editorial board member (2009–).

Glycobiology, Editorial board member (2011–).

Scientific Reports, Editorial board member (2015–).

International Journal of Molecular Sciences, Editorial board member (2017–2025).

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－.

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－2026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－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／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)」(代表者: 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)」(代表者: 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）

原島 崇徳（助教）

大友 章裕（特別訪問研究員）

BOUISSETE, Tom（インターンシップ）

MEKSERIWATTANA, Wid（インターンシップ）

山本 真由子（技術支援員）

山地 つぐみ（技術支援員）

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，1 分子計測，タンパク質工学，DNA ナノテクノロジー

A-2) 研究課題：

- a) 人工 DNA 金ナノ粒子モーターの運動機構の解明，高性能化，高機能化
- b) 回転イオンポンプ V-ATPase の可逆的エネルギー変換の実証とイオン選択性の改変
- c) リニア分子モーターキネシンの全原子分子動力学シミュレーションによる機構解明
- d) 高速 AFM の時間分解能の向上と回転分子モーター F₁-ATPase への適用
- e) 2つのキチン結合ドメインを持つリニア分子モーター海洋細菌キチナーゼの 1 分子計測
- f) 金属錯体形成駆動の DNA ナノチューブの成長・崩壊ダイナミクスの解析
- g) 生細胞内 Na⁺ 濃度計測プローブの開発と網羅的 1 細菌計測

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) DNA 修飾金ナノ粒子，RNA 修飾ガラス基板，RNA 分解酵素で構成される人工分子モーター，DNA 金ナノ粒子モーターの幾何学的速度論シミュレーションを開発して運動速度，運動距離，運動一方向性の粒径依存性を網羅的に調べ，運動速度が粒径の大きさに依存しない機構，運動距離，運動一方向性に依存する機構を解明し，性能のさらなる改善に必要な因子を特定した（Harashima T. *et al.*, *bioRxiv* 2026）。さらに，金ナノロッドの利用によるモーター本体への形状異方性の導入や，DNA ナノテクノロジーを利用した一次元 RNA 修飾 DNA ナノチューブレールの構築に成功し，DNA 金ナノ粒子モーターの完全な一方向性運動を達成することに成功した（Harashima T. *et al.*, Unpublished）。
- b) 回転型イオンポンプ V-ATPase (V₀V₁) は，ATP 加水分解反応を触媒する V₁ とイオン輸送を担う V₀ の 2つの回転分子モーターの複合体である。村田和義博士（ExCELLS 特任教授）との共同研究により，V₀ の回転子のイオン結合部位を改変してイオン選択性を Na⁺ から水素イオン (H⁺) に変えることに成功し，イオン選択性の構造的基盤を解明した（Otomo A. *et al.*, Unpublished）。また，本変異体を活用し，V₀ の固定子の 2つのイオン透過チャネルの Na⁺ 親和性に非対称性が存在することを特定し，電気化学ポテンシャルに抗う能動輸送の構造的基盤を解明した（Otomo A. *et al.*, Unpublished）。さらに野生型では，ATP アナログの AMPPNP を結合した全体構造の分解能の改善に成功し，V₁ のヌクレオチド結合構造および V₀ の準安定中間構造を明らかにした（Lee Y. E. *et al.*, Unpublished）。
- c) 鄭誠虎博士（熊本大学教授）との共同研究により，スーパーコンピュータ富岳を用いた二量体リニア分子モーターキネシンの全原子分子動力学シミュレーションに取り組み，微小管から解離した後足が微小管に結合した前足の右側を追い越すことを原子レベルで初めて明らかにした（Chong S. H. and Iino R., *Biophys. J.* 2026）。

- d) 安藤敏夫博士（金沢大学特任教授）との共同研究により，高速原子間力顕微鏡（高速 AFM）装置の改善で 1 分子計測の時間分解能を 10 倍向上することに成功し，回転分子モーター F₁-ATPase に適用して中間構造の同定と寿命の計測に成功した（Fukuda S. *et al.*, *bioRxiv* 2025）。
- e) 中村彰彦博士（静岡大学教授）との共同研究により，2つのキチン結合ドメインを持つリニア分子モーターである海洋細菌由来キチナーゼの生化学計測と 1 分子計測を行い，低濃度キチンに対する親和性と分解効率が向上していることを明らかにし，栄養源が希薄な海洋における細菌の生存戦略の一端を解明した（Tanimoto H. *et al.*, *bioRxiv* 2026）。
- f) 竹澤悠典博士（芝浦工業大学教授）との共同研究により，DNA タイルの末端に C-C ミスマッチを導入して Ag⁺ との錯形成で形成する DNA ナノチューブを設計した。全反射蛍光顕微鏡を用いた単一ナノチューブ観察により，チューブの形成（重合と連結）と崩壊（脱重合と破断）のダイナミクスを明らかにした（Harashima T. *et al.*, Unpublished）。
- g) 蓑島維文博士（大阪大学准教授）との共同研究により，細胞内に共有結合で固定・保持される蛍光性 Na⁺ 指示薬を開発および個々の大腸菌内の Na⁺ 濃度のハイスループット計測に成功し，大腸菌内 Na⁺ 濃度の分布と恒常性を明らかにした（Otomo A., Minoshima M. *et al.*, Unpublished）。

B-1) 学術論文

T. MATSUZAKI, T. SAEKI, F. YAMAZAKI, N. KOYAMA, T. OKUBO, D. HOMBE, Y. OGURA, Y. HASHINO, R. TATSUMI-KOGA, N. KOGA, R. IINO and A. NAKAMURA, “Development and Production of Moderate-Thermophilic PET Hydrolase for PET Bottle and Fiber Recycling,” *ACS Sustainable Chem. Eng.* **13**(27), 10404–10417 (2025). DOI: 10.1021/acssuschemeng.5c01602

A. OTOMO, L. G. HUI ZHU, Y. OKUNI, M. YAMAMOTO and R. IINO, “ATP Synthesis of *Enterococcus hirae* V-ATPase Driven by Sodium Motive Force,” *J. Biol. Chem.* **301**(4), 108422 (2025). DOI: 10.1016/j.jbc.2025.108422

B-4) 招待講演

飯野亮太, 「生体・人工分子モーターの性能解析と性能向上」, 理研「一分子の科学」研究発表会, 和光, 2026 年 2 月.

飯野亮太, 「自律的に働く分子機械の性能を考える」, ASMat キャンプ 2025, 熱海, 2025 年 12 月.

T. HARASHIMA, “Geometry engineering of DNA artificial molecular motor for perfect unidirectionality,” The 63rd Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Nara, 2025 年 9 月.

T. HARASHIMA, “Rational engineering for high-performance DNA artificial molecular motor,” The 25th Annual Meeting of the Protein Science Society of Japan, Himeji, 2025 年 6 月.

R. IINO, “Energy conversion mechanism of an ATP-driven rotary ion pump *Enterococcus hirae* V-ATPase,” International Workshop on Bacterial Flagella and BioMachineries, Taoyuan (Taiwan), March 2026.

R. IINO, “Rational engineering of high performance artificial molecular motors,” East Asian Single Molecule Biophysics Symposium 2025 (EASMB2025), Singapore (Singapore), November 2025.

R. IINO, “Single-molecule imaging and engineering of molecular motors,” Colloquium at Institute of Atomic and Molecular Sciences (IAMS), Academia Sinica, Taipei (Taiwan), October 2025.

R. IINO, “Rational Engineering of High Performance Artificial Molecular Motors,” Telluride Workshop on Protein Dynamics, Telluride (USA), July 2025.

R. IINO and T. HARASHIMA, “Rational engineering of high performance artificial molecular motors,” 20th Asian Chemical Congress (20ACC), Bangkok (Thailand), June 2025.

B-5) 特許出願

登録

特許第 7732636 号, 「タンパク質, ポリヌクレオチド, 組換えベクター, 形質転換体, ポリエチレンテレフタレート分解用組成物, 及びリサイクル品の製造方法」, 中村彰彦, 飯野亮太 (静岡大学, 自然科学研究機構), 2021 年. (登録日 2025 年 8 月 25 日)

B-6) 受賞, 表彰

原島崇徳, 第 20 回わかしゃち奨励賞基礎科学研究部門優秀賞 (2026).

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学会評議員 (2025–2028).

日本生物物理学学会副会長, 理事 (2025–2027).

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).

学会誌編集委員

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

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

理科教育活動

岡崎市小中学校理科作品展「未来の科学者賞」選考委員 (2024–2025).

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理数探究基礎講師 (2025). (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, 講義「構造生体分子科学」, 2025 年 4 月 – .

総合研究大学院大学先端学術院, 講義「構造生体分子科学」, 2025 年 12 月. (原島崇徳)

B-10) 競争的資金

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).

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).

(公財)立松財団A1. 特別研究助成,「世界最速の人工分子モノレールの設計と可視化」, 原島崇徳 (2025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),「DNA 人工分子モーターの一次元レール開発」, 原島崇徳 (2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

ナノサイズの分子モーターは、人間が作ったマクロなモーターと比べてはるかに小さく、ブラウン運動や構造変化の活用等、異なる作動原理で動く。今後も引き続き、天然の生体分子モーターの1分子計測や構造解析でその作動原理を調べるだけでなく、天然に存在しない人工分子モーターを積極的につくることでその設計原理を理解する。また、現在、機械工学やロボット工学の専門家との共同研究を推進中であり、ナノサイズの分子機械とマクロな機械に共通する原理や相違点を明らかにする。これらの取り組みで、天然の生体分子モーターを凌駕する性能や機能を持つ人工分子モーターの創製、および、ナノ～マクロのスケールを飛び越えた分子モーターシステムの創製に繋げる。例えば、ヘテロな塩基配列を有するDNA 金ナノ粒子モーターを二量体化して外部からのDNA 添加で運動速度や運動方向の制御を可能にし、人工分子モーターの動きの変化に基づく高感度センシングを可能にする。また、天然分子では困難な分岐型、網目型DNA ナノチューブレールネットワークを構築し、分子モーターの経路選択に基づく論理回路計算を可能にする。

猪股 晃介（特任准教授）（2025 年 10 月 1 日着任）

福富 幸代（事務支援員）

A-1) 専門領域：NMR 分光学，生化学，生物物理学，タンパク質科学

A-2) 研究課題：

- a) In-cell NMR による哺乳動物細胞内におけるタンパク質の拡散解析
- b) 細胞内タンパク質を標的とした室温超編極 NMR 法の確立
- c) クマムシの乾燥耐性に関わるタンパク質 CAHS1 の in-cell NMR 解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) In-cell NMR を用いて哺乳動物細胞内におけるタンパク質の並進拡散係数 (D) および回転相関時間 (τ_c) を直接計測し，細胞特有の高粘性・高分子密度環境がこれらの動態に及ぼす影響を定量的に明らかにすることを目的とする研究を進めた。本年度は，細胞内におけるタンパク質の並進・回転拡散を評価するための技術基盤の確立を行なった。モデルタンパク質としてユビキチン変異体 (L8A, I44A, V70A, D77) を，モデル細胞として HeLa 細胞を用いて，in-cell NMR による並進拡散係数 (D) および回転相関時間 (τ_c) の定量を試みた。その結果，並進拡散係数 (D) については希薄溶液中（約 $2.2 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ ）と比較して，細胞内ではおよそ $4.9 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ と約 1/4 まで大きく低下することが確認された。一方，回転相関時間 (τ_c) については，希薄溶液中に比べ細胞内では τ_c が増大していることを示唆する初期データが得られているものの，高い定量性を確保することができていない。現在，測定条件や解析パラメータ等を最適化することで解決を試みている。
- b) In-cell NMR の高感度化および計測時間の大幅な短縮を狙った室温超編極 NMR 法の確立を目的とする研究を，スピン生命科学コア・スピン細胞生物学研究グループの宮ノ入客員准教授とともに進めた。本年度は，光増感剤を用いる光誘起動的核分極 (Photo-CIDNP) に着目し，LED 光源で室温・溶液条件下にラジカルペアを生成して芳香族アミノ酸残基等の信号を高感度化できる特長を活かしつつ，装置メーカーと共同で「LED 照射 NMR システム」を構築し，バイオリアクター型 in-cell NMR へ接続可能な測定基盤を整備した。その実証として，均一 ^{13}C , ^{15}N 標識 α シヌクレイン中の Tyr 残基観測で信号感度の 2-3 倍向上を確認した一方，偏極寿命が短いという課題も明確化した。このボトルネックに対し，縦緩和時間 (T_1) の短さを RO-SAIL アミノ酸標識で改善する方針を立て，Photo-CIDNP 感度が 100 倍程度向上すること，さらに HeLa S3 抽出液中でも成立することを示し，細胞内適用へ向けた実行可能性を高めた。
- c) クマムシの乾燥耐性に関与するタンパク質 CAHS1 について，in-cell NMR 解析に向けた予備検討を実施した。使用した細胞はクマムシ由来細胞ではなく HeLa 細胞（ヒト培養細胞）である。これは，①現時点でクマムシの株化細胞が樹立されていないこと，② HeLa 細胞内においても，クマムシ細胞内と同様に乾燥耐性獲得に関連する CAHS1 の凝縮体形成が確認されていること，以上の 2 点を踏まえた選択である。本年度は，in-cell NMR 計測に供する試料調製条件を確立した。さらに，確立した条件下で ^{15}N 標識 CAHS1 を用いた in-cell NMR 測定を試みたところ，in-cell NMR スペクトルでは多くのピークが顕著な線幅増大により消失した。一方，in-cell NMR 実験後に調製した細胞破砕液（破砕に伴い希釈された溶液）の NMR スペクトルでは，多数のピークが検出された。以上の 2 種のスペクトルの比較から，CAHS1 は HeLa 細胞内で高次構造体（あるいは凝集・凝縮体）を形成している可能性が示唆された。この結果は，既報・事前情報とも整合的であり，今後の in-cell NMR 解析の方向性を支持する所見である。

B-8) 大学等での講義, 客員

大阪大学蛋白質研究所, 招へい准教授, 2025年6月–2026年3月.

理化学研究所, 客員研究員, 2026年2月–2027年3月.

C) 研究活動の課題と展望

本年度の課題は, (a)in-cell NMR 拡散解析において並進拡散係数 D の再現性・汎用性を確立するとともに, 回転相関時間 τ_c を高い定量性で評価できる測定・解析条件(パルス系列, 温度制御, フィット手順)の整備を進めること, (b)室温超編極(Photo-CIDNP)で偏極寿命の短さを克服し, in-cell NMR で感度向上と測定時間短縮を両立する実装技術を完成させること, (c)CAHSI で線幅増大により信号が消失する問題に対し, 観測可能な条件設定の確立と測定プロトコル最適化に注力することである。今後は(a)モデル系を複数タンパク質へ拡張しつつ, 同一細胞種内の細胞状態(温度, pH, ATP 枯渇など)変化に伴う動態を定量比較し, 細胞内粘性・相互作用の寄与を切り分ける。(b)RO-SAIL 標識等による T_1 改善を軸に, 抽出液から生細胞へ段階的に実証し, バイオリアクター型 in-cell NMR へ統合し, 再現性検証を強化する。(c)測定後の破碎液解析も併用して解釈を確立し, 乾燥耐性機構の分子像に迫る。

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））

星野 竜青（大学院生）

山田 裕輝（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

H. OHTA, H. GODA, H. FUJINAGA, Y. SUENAGA, K. KANBARA, A. TAZAWA, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI and M. HAYASHI, “Synthesis of Oligo(Triarylphosphine Sulfide)s for Stabilizing Pd Nanoparticles and Modulating Selective Semihydrogenation of Terminal Aryl Alkynes,” *Asian J. Org. Chem.* **14**(8), e00361 (2025). DOI: 10.1002/ajoc.202500361

B-4) 招待講演

魚住泰広,「新たな機能性触媒との出会い：不斉触媒, 水中機能性触媒, ナノ触媒, 光触媒」, 第37回万有札幌シンポジウム, 札幌, 2025年7月.

魚住泰広,「水中機能性高分子担持触媒の創製」, 京都大学物質エネルギー化学学術講演会, 京都, 2025年6月.

B-5) 特許出願

WO2025142930 (A1), “Polycyclic Compound, Method for Reducing Organic Compound, and Method for Coupling Organic Compound,” S. OKUMURA and Y. UOZUMI (National Institute of Natural Sciences), 2024年.

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 (2023–2027).

学会誌編集委員

SYNLETT 誌アジア地区編集主幹 (2002–), 編集委員 (2025).

SYNFACTS 誌編集委員 (2005–).

B-8) 大学等での講義, 客員

京都大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 2025年5月–2026年3月.

C) 研究活動の課題と展望

2000年にゼロからのスタートを切った精密有機分子変換反応のaqueous-switching, heterogeneous-switchingの試みも十分な成果と蓄積を得てきた。理想の有機分子変換を標榜した当研究室の歩みの中で多くの水中機能性固定化錯体触媒, 水中機能性固定化ナノ金属触媒を開発し, その幾つかは汎用性ある触媒として市販されるに至っている。これらの研究は科学研究費補助金(基盤研究, 新学術研究など)にくわえ, 多くの競争的外部研究費を得て推進してきた。即ちこれまでに水中機能性固定化触媒に関する「グリーンナノ触媒」CREST研究(2002年10月–2008年3月), 続いてその成果を実践的に発展させるMETI-NEDOプロジェクト(2008年9月–2012年2月), 稀少元素の元素循環・元素減量・元素代替に焦点を当てた「元素戦略」CREST研究(2011年10月–2017年3月)を展開してきた。さらに2014年12月からACCEL研究(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。なかでも最近では未開拓元素群の触媒反応性(とくにCu, Fe, Ag)の探索と確立, さらには分子の自己集積化に立脚した触媒機能の自発的獲得など目指した研究開発を推進しつつある。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。

檜山 儀恵（准教授）（2014 年 6 月 1 日着任）

大塚 尚哉（助教）
松雪 洋恵（特任研究員）
寺島 悠人（大学院生）
中井 愛里（技術支援員）
原田 晋子（技術支援員（派遣））
高野 幸太（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：

- a) 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
- b) ハロゲン結合を活用する高分子触媒反応場の開発
- c) 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
- d) 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
- e) 化学反応空間の構築と有機合成反応開発への応用
- f) 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

- a) 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、ブ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。
- b) 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。
- c) エチニルビスピリジンを配位子とするヨードニウム錯体やジアリールヨードニウムトリヨードの合成と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。椋山グループでは、自動有機合成システムとしてCole-Parmer社のIntegrity-10に後処理、サンプル搬送、得られた生成物の分析・同定、単離精製機能を連携導入した。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。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と拡張が可能である。さらに、遠隔操作に対応し、データ駆動型研究と本装置の融合研究を精力的に推進している。

B-1) 学術論文

N. OHTSUKA, M. Z. MOHD ARIS, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Data-Guided Rational Design of Additives for Halogenation of Highly Fluorinated Naphthalenes: Integrating Fluorine Chemistry and Machine Learning,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **28**, 6917–6927 (2026). DOI: DOI: 10.1039/d5cp03554f

M. KATO, F. NAKASHIMA, N. OHTSUKA, Y. NISHIOKA, A. IZUMISEKI, T. FUJINAMI, S. OISHI, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Data-Integrated Elucidation of Structure–Activity Relationships toward the Rational Design of Perfluoriodoarene-Based Halogen-Bond Donor Catalysts,” *J. Org. Chem.* **91**(5), 2088–2104 (2026). DOI: 10.1021/acs.joc.5c02704

K. TAKEDA, N. OHTSUKA, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Machine Learning-Guided Synthesis of Prospective Organic Molecular Materials: An Algorithm with Latent Variables for Understanding and Predicting Experimentally Unobservable Reactions,” *Artif. Intell. Chem.* **3**(2), 100096 (2025). DOI: 10.1016/j.aichem.2025.100096

B-4) 招待講演

椋山儀恵, 「AI Co-Scientist との協働による 有機合成研究の新展開をめざして」, 令和7年度第2回合成横断技術領域ワークショップ, 愛知県岡崎市, 2026年3月.

椋山儀恵, 「夢の「自動有機合成AIロボット」を実現するために—有機合成の技・知を拡張し誰もが分子を創る世界へ—」, 第3回研究者をつなぐ研究フォーラム～ライフサイエンスの交差点～, オンライン開催, 2025年8月.

大塚尚哉, 「多環芳香族分子の全フッ素ハロゲン化戦略に基づく新規 π 共役分子の創製」, デジタル有機合成若手セミナー, 岩手県盛岡市, 2025年6月.

大塚尚哉,「多環芳香族分子の全フッ素ハロゲン化戦略に基づく新規 π 共役分子の創製」,第2回東海ハロゲン科学研究会,静岡県静岡市,2025年6月.

N. MOMIYAMA, “The Reactivity Parameters-enabled Chemical Space of Catalysis: Design of Mono-Pyridyl Iodine(I) Complex Catalysts,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), Honolulu, Hawaii (USA), December 2025.

N. MOMIYAMA, “The Chemical Reactivity-Based Space for Organic Synthesis,” The 20th Asian Chemical Congress (20ACC) or ASIACHEM2025, Bangkok (Thailand), June 2025.

B-6) 受賞, 表彰

寺島悠人, 日本化学会東海支部長賞 (2026).

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-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」(代表者: 榎山儀恵), 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(代表者: 大嶋孝志), 榎山儀恵 (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」(代表者: 鈴木敏泰), 榎山儀恵 (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」, 榎山儀恵 (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。2025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, 1報の論文を *ChemRxiv* で公開し, 国際誌に学術論文3報が掲載された。また, 執筆途中の論文が多数あり, 2026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）
平田 直（特任専門員）
吉田 瑠（大学院生）
加納 春華（大学院生）
小藤 夏生（大学院生）
中野 さち子（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) 2つの平面をねじった形をもつ非平面芳香族分子は，それぞれの平面が分子間で π - π スタックすることで3次元的なつながりをもった固体構造を取りうることが知られている。3次元 π - π スタック構造は配向制御の必要のない半導体材料として有用である一方で，ねじれ構造にはひずみがかかるために平面分子と比較して合成が困難な場合が多い。我々は，チオフェン環およびベンゼン環からなる平面分子に対して合成最終段階で立体障害となるメチル基を導入することで，簡便にねじれ構造を作ること成功した。得られた分子はねじれ構造によって2つの π 平面が異なる向きに向いており，その中でもジチエノチオフェン誘導体は結晶中で3次元的な π - π スタックが見られた。OFET 特性評価によって，この分子が半導体として利用可能であることを明らかにした。本成果は，EurekAlert!，日経テクニクスサイトなど複数のメディアで取り上げられた。

我々は，2つのメシチル（2,4,6-トリメチルフェニル）基を有するテトラシアノジヒドロジピラジノピラジンが，15種類の有機溶媒とクラスレート結晶を形成することを発見した。理論計算によると，これらのホストネットワークは π - π 相互作用とCN- π 相互作用によって構築されていると示唆された。これらの分子間相互作用は比較的弱いいため，ホストネットワークはゲスト分子に応じて柔軟に変化することができる。ゲストフリーの結晶は，溶媒蒸気の吸着・脱着を介した結晶間相転移によって，クラスレート結晶へと可逆的に転移することができる。

B-1) 学術論文

K. NORO, A. TANI, T. TADOKORO, T. HARIMOTO, K. SUGAWARA, T. SUZUKI, T. ONO and Y. ISHIGAKI, "Dual-State Mechano- and Electrochromic Responses Enabled by Sterically Strained Diazaanthraquinodimethanes," *J. Org. Chem.* **90**(36), 12727–12733 (2025). DOI: 10.1021/acs.joc.5c01545

M. NAGASE, R. YOSHIDA, S. NAKANO, T. HIROSE and Y. SEGAWA, “Synthesis, Structure, and Properties of Twisted π -Conjugated Molecules Featuring Three-Dimensional π - π Interactions in Solid States,” *Chem. Commun.* **61(60)**, 11187–11190 (2025). DOI: 10.1039/D5CC02387D

T. HARIMOTO, M. KIKUCHI, T. SUZUKI and Y. ISHIGAKI, “Diverse Redox-Mediated Transformations to Realize the para-Quinoid, σ -Bond, and ortho-Diphenquinoid Forms,” *Nat. Commun.* **16(1)**, 4088 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-59317-w

K. WATANABE, H. SUGIYAMA and Y. SEGAWA, “Diverse Tetracyanodihydrodipyrzazinopyrazine Clathrate Crystals Assembled from Weak Intermolecular Interactions,” *CrystEngComm* **27(21)**, 3552–3559 (2025). DOI: 10.1039/D5CE00289C

B-7) 学会および社会的活動

理科教育活動

三重県立津高等学校 SSH 課題研究に係る指導・助言 (2025).

三重県立津高等学校 SSH 課題研究に係る指導・助言 (2025). (張本 尚)

B-8) 大学等での講義, 客員

名城大学理工学部, 非常勤講師, 2025 年 9 月–2026 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), 「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–2025 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, 「計算化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).

矢崎科学技術振興記念財団一般研究助成, 「パドル型 π 共役分子を用いた高機能有機半導体の開発」, 瀬川泰知 (2025 年度).

科研費基盤研究(B), 「トポロジカル π 共役化学の 3 次元空間展開」, 瀬川泰知 (2025 年度–2028 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).

科研費若手研究, 「3D 集積を実現する π 共役多面体分子の創製」, 張本 尚 (2025 年度–2026 年度).

C) 研究活動の課題と展望

2025 年 4 月–2026 年 3 月の 1 年間で, 2 報の学術論文および 2 報のプレプリントを発表した。これらは我々が目指す π 共役ネットワーク構築法の開発や, 電子回折結晶構造解析の構造有機化学分野への応用, さらにこれらから派生したクラスレート結晶の発見や非平面 π 共役半導体分子の開発など多岐に渡る。複数のメディアで取り上げられるなど注目度の高い成果となっている。

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）

HE, Wei（特任助教）

増田 道子（事務支援員）

野川 京子（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) 次世代型結晶スポンジ法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 結晶スポンジ法とは，結晶スポンジと呼ばれる結晶の中で解析対象となる化合物を整列させ，X線回折法によって構造解析を行なう手法である。結晶スポンジ法を用いることで，結晶化しない化合物であってもX線回折法による構造解析が可能になるといった利点があるものの，解析できる化合物は主に分子量 300 程度の疎水性化合物に限定されるという問題があった。そこで本研究課題では，この問題を克服するために，次世代型の結晶スポンジ（第二世代結晶スポンジ）の開発を行なった。第二世代結晶スポンジは，優れた分子捕捉力を持つかご型分子を結晶内に固定するという新しい設計に基づいて開発された。さらに第二世代結晶スポンジを使用した多数の構造解析によって，従来は解析困難であった分子量 1,000 を超える中分子や，高極性分子の構造解析が可能になったことを立証した。

B-1) 学術論文

K. IIZUKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “Medium-Sized-Molecule Encapsulation in Coordination Cages *via* Solid-State Mechanochemistry,” *J. Am. Chem. Soc.* **148**(4), 4588–4598 (2026). DOI: 10.1021/jacs.5c20185

R. EBIHARA, T. NAKAMA, K. MORISHIMA, M. YAGI-UTSUMI, M. SUGIYAMA and M. FUJITA, “Monomer Isolation from Oligomeric Proteins within Coordination Cages to Study Interface Ligand Binding,” *J. Am. Chem. Soc.* **148**(1), 1872–1880 (2026). DOI: 10.1021/jacs.5c19487

K. TSUKADA, F. SATO, T. MATSUYAMA, R. MATSUDA, T. OZAKI, Y. MORISHITA, S. FURUMURA, Y. HOMMA, H. SEKIYA, A. SUGAWARA, M. KUBOTA, T. MITSUHASHI, Y. YASUNO, T. SHINADA, R. NAGATA, T. KUZUYAMA, T. TANIGUCHI, M. FUJITA, M. UCHIYAMA and T. ASAI, “Vinigrol Tricyclic Scaffold Biosynthesis Employs an Atypical Terpene Cyclase and a Multipotent Cyclization Cascade,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(49), 45168–45177 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c14400

H. K. LIU, T. NAKAMA, S. FUNAMI, R. EBIHARA, T. MITSUHASHI and M. FUJITA, “Enzyme Immobilization in Porous Crystals *via* Cage Encapsulation,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(50), e202517027 (2025). DOI: 10.1002/anie.202517027

- C. PARK, S. TSUTSUMI, T. MITSUHASHI and M. FUJITA**, “Discovery of a New Type of Terpene Synthase Coded by an Orphan Gene in a Giant Virus,” *Biochemistry* **64**(18), 3866–3871 (2025). DOI: 10.1021/acs.biochem.5c00354
- R. TANAKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA**, “A Visible-Light-Responsive Octahedral Cage for Efficient and Selective Cross-[2 + 2] Cycloadditions,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(29), 25142–25147 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c07355
- S. YOSHIDA, S. BABA, N. MIZUNO, Y. NAKAMURA, S. SATO and M. FUJITA**, “Micro Crystalline Sponge Method Combined with Small-Wedge Synchrotron Crystallography for Nanogram Scale Molecular Structure Elucidation,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(27), 23917–23922 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c06360
- H. TAKEZAWA, Y. TAMURA and M. FUJITA**, “Step-by-Step Self-Assembly of a Double-Walled Knotted Cage with Increasing Topological Complexity,” *Chem. –Eur. J.* **31**(27), e202500009 (2025). DOI: 10.1002/chem.202500009
- Y. INOMATA, S. OGUMA, N. SAGARA, A. NISHIJIMA, Y. SABUROMARU, S. YOSHIDA, T. KAJITANI, K. SHIMOKAWA, S. SATO, M. YOSHIKAWA, M. FUJITA and T. SAWADA**, “An $M_{60}L_{60}$ Metal-Peptide Capsid with a 60-Crossing Woven Network,” *Chem* **11**(9), 102555 (2025). DOI: 10.1016/j.chempr.2025.102555
- T. NAKAMA, M. TADOKORO, R. EBIHARA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and M. FUJITA**, “Proximity-Induced Saccharide Binding to a Protein’s Active Site within a Confined Cavity of Coordination Cages,” *Chem. Sci.* **16**(23), 10549–10554 (2025). DOI: 10.1039/d5sc00782h
- S. OGUMA, Y. INOMATA, A. HAYAKAWA, T. NAKAMA, M. FUJITA and T. SAWADA**, “Helical Sense Control of Metal-Peptide Torus Frameworks Leading to the Folding and Assembly of a $Ag_{21}L_{14}$ Braided Peptide Nanotube,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(11), 9098–9102 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c01458
- W. HE, H. TAKEZAWA, R. YAKUSHIJI, S. YOSHIDA, S. SATO and M. FUJITA**, “Host-Guest Chemistry in a Capillary Applied to the Facilitation of the Crystalline Sponge Method,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(20), e202501025 (2025). DOI: 10.1002/anie.202501025
- W. HE, Y. YU, K. IIZUKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA**, “Supramolecular Coordination Cages as Crystalline Sponges through a Symmetry Mismatch Strategy,” *Nat. Chem.* **17**, 653–662 (2025). DOI: 10.1038/s41557-025-01750-x

B-4) 招待講演

- M. FUJITA**, “Molecular Confinement Effects,” Gordon Research Conference Self-Assembly and Supramolecular Chemistry, Vaud (Switzerland), May 2025.
- M. FUJITA**, “Molecular Confinement Effects by Self-Assembled Cages,” ISMSC 2025, Kyoto (Japan), May 2025.
- M. FUJITA**, “Cavity-controlled photoreactions within self-assembled coordination cages,” 14th SolTech Conference, Bayreuth (Germany), September 2025.
- M. FUJITA**, “Molecular Confinement Effects in Self-Assembled Cages,” SAOG 40th anniversary meeting, Fribourg (Switzerland), February 2026.

B-6) 受賞, 表彰

- 藤田 誠, American Academy of Arts & Sciences 外国人名誉会員 (2025).
- 藤田 誠, The Palladium Global Science Award (2025).

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

本年度の研究によって、結晶スポンジ法を用いて構造決定できる化合物の範囲を大幅に拡大することに成功した。分子の正確な構造を決定することは、分子に関わるあらゆる分野で重要である一方、大変な困難が伴うことが多く、仮に構造決定が可能な場合であっても手間と時間がかかる作業であることが知られてきた。今後は結晶スポンジ法によって分子の迅速な構造決定が容易に達成されるようになり、科学の広い分野の研究が大幅に加速すると期待される。

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。液体分子と固体分子が接触する場所（分子論的な界面）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（外界との接続領域）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半導体光触媒（物質変換）と液体潤滑（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。①電子励起状態にあるタンタル酸ナトリウム光触媒の量子化学シミュレーション②氷と不凍液体が接する界面をナノ力学計測するために原子間力顕微鏡を冷却する技術の開発が本年度の主な成果である。

B-1) 学術論文

R. MORIMOTO, H. URATANI, H. ONISHI and H. SATO, “Dopant Distributions and Band-Edge Positions in Sr-Doped NaTaO₃: A First-Principles Study,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **28(8)**, 5111–5118 (2026). DOI: 10.1039/D5CP04385A

H. URATANI and H. ONISHI, “Quantum-Chemical Molecular Dynamics Study of Polaron Formation in Perovskite NaTaO₃ as a Water-Splitting Photocatalyst,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27(28)**, 14748–14753 (2025). DOI: 10.1039/D5CP01859E

Z. LU, R. YANAGISAWA, S. MORIGUCHI, T. UEDA, K. NAKAMOTO, T. MINATO and H. ONISHI, “Frequency-Modulation AFM in Sub-Zero Antifreeze Liquid,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **64(5)**, 05SP05 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/adcccc

M. YANAGI, J. CASANOVA-CHÁFER, T. HARA, Y. H. CHEW, T. YOSHIDA, H. ONISHI, C. BITTENCOURT and N. ICHIKUNI, “Calcination-Driven Co⁴⁺ Incorporation in Hydrothermally Synthesized NaTaO₃,” *Chem. Lett.* **54(4)**, upaf053 (2025). DOI: 10.1093/chemle/upaf053

B-4) 招待講演

大西 洋, 「半導体光触媒による酸素生成反応：マイクロ電極計測と酸素拡散シミュレーションの融合」, 電気化学会北陸支部秋季大会, 富山大学, 富山, 2025 年 11 月.

大西 洋, 「半導体光触媒による水分解反応：どうしてそんなに収率が高いのか？」, 日本学術会議公開シンポジウム「カーボンニュートラルに向けた水素の多面的な利活用～第1回水素を作る～」, 東京(ハイブリッド開催), 2025 年 8 月.

大西 洋,「非水液体中での原子間力顕微鏡 (AFM) 計測」, 埼玉大学, さいたま, 2025 年 6 月.

大西 洋,「表面科学研究者から見たトライボロジー」, 分子研研究会「トライボロジーの分子科学」, 岡崎, 2025 年 4 月.

H. ONISHI, “High-speed analysis of oxygen evolution kinetics in water using microamperometry,” 2nd RIST International Symposium: Carbon Value Science & Technology, Noda, March 2026.

H. ONISHI, “Transient Amperometry for Unveiling the Fundamental Nature of Water-Oxide Interactions in Photocatalysis,” 107th Workshop IUVESTA-ZCAM-UNIZAR Oxides for Energy Applications: Bridging Experiment and Theory to Understand Functionality, zaragoza (spain), July 2025.

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–).

学会の組織委員等

33rd International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM33) 実行委員長 (2025–2026).

16th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-16) / 34th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM34) プログラム委員会委員長 (2025–2027).

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–).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (A), 「半導体光触媒による水の 4 電子酸化: 水中オペランド計測によるミリ秒反応化学の解明」, 大西 洋 (2025 年度–2028 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】液体–固体界面 (不凍液–氷界面と潤滑油–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。

澤井 仁美 (准教授(クロスアポイントメント*¹)) (2024年4月1日～2025年3月31日)
(教授(クロスアポイントメント*²)) (2025年4月1日着任)

村木 めぐみ (技術支援員)

野村 潤子 (事務支援員)

*1 長崎大学大学院総合生産科学研究科

*2 大阪公立大学大学院理学研究科

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) 密着型軟X線顕微鏡を用いた赤血球内の鉄分布イメージング
- b) 細胞内鉄輸送タンパク質のヘム鉄との相互作用による細胞内ヘム恒常性制御機構
- c) 病原菌のヘムセンサータンパク質を標的とする新規抗菌素材としてのVHH抗体の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 生体内の鉄は主に Fe^{2+} の状態で存在するが、 Fe^{2+} はフェントン反応を促進し活性酸素種を発生させ、 Fe^{2+} 依存的細胞死フェロトーシスを引き起こす。近年、フェロトーシスは癌や虚血性疾患の起因となることが明らかになっており、細胞内の鉄の局在と分布を定量的に可視化することは医学的にも有益な情報をもたらす。本研究では、UVSOR-IIIにて岩山グループが開発中の「密着型軟X線顕微鏡」を用いて、非破壊の状態の生細胞に対して鉄の分布を定量的に検出できるイメージング法の確立を目指した。赤血球をモデル細胞として、鉄のL吸収端付近のエネルギー領域の軟X線を用いてエネルギー依存的な軟X線透過像を収集し、それらの画像上の各ピクセルにおけるX線吸収スペクトルを抽出して機械学習によりクラスター解析することで、赤血球中の相対的な鉄濃度分布をイメージングする方法を確立した。
- b) 細胞内で鉄イオンの輸送を介助するタンパク質として報告されているPCBPが、 Fe^{2+} だけではなくポルフィリン鉄錯体であるヘムを結合する新たな性質を見出した。各種分光解析により、PCBPは1分子あたり3分子までのヘムを結合することがわかった。最近、タンパク質のヘム結合解析のために開発されたヘム修飾プローブを用いてPCBPのヘム結合部位を探索するとともに、部位特異的変異体解析により、PCBPに結合する3分子のヘムはそれぞれ異なる部位に結合し、それらの配位構造が異なることを明らかにした。また、PCBPはヘムを安定に結合できることから、ヘム結合型PCBPがアポ型のヘム分解酵素HO1にヘムを渡し、HO1によるヘム分解過程を介助する「ヘム挿入タンパク質」として機能するかを、各種複合体解析ならびに分光解析により検討した。その結果、ヘム結合型PCBPのみがアポ型HO1と複合体を形成することが明らかになったが、PCBPからアポ型HO1にヘムが移行して挿入される速度は、遊離ヘムがアポ型HO1に挿入される速度よりもかなり遅かった。したがって、PCBPは、アポ型HO1にヘムを挿入するのではなく、鉄栄養素として食物から獲得したり、細胞内で生合成した貴重なヘムがHO1に奪われて分解されないようにするための「ヘム捕捉タンパク質」として機能する新たな可能性を見出した。
- 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、ヘムセンサータンパク質の機能を阻害する分子は抗菌薬の開発に有用であると考え、ヘムセンサータンパク質に対する抗体を作製した。各種タンパク質間相互作用解析により、作製した抗体の機能を詳細に検討した結果、この抗体はヘムセンサータンパク質に特異的かつ強く結合するだけでなく、ヘム感知能を阻害できることを明らかにした。

B-1) 学術論文

A. HORIKAWA, R. OKUBO, N. HISHIKURA, R. WATANABE, K. KURASHIMA-ITO, P. M. SAYEESH, K. INOMATA, M. MISHIMA, H. KOTEISHI, H. SAWAI, Y. SHIRO, T. IKEYA and Y. ITO, “Backbone and Side Chain ^1H , ^{13}C and ^{15}N Resonance Assignments and Secondary Structure Determination of the Rhizobial FixJ,” *Biomol. NMR Assignments* **19**, 77–82 (2025). DOI: 10.1007/s12104-025-10221-w

H. SAWAI, “The Importance of Ferric Reductases for Iron Uptake in Humans,” *Front. Chem. Biol.* **4**, 1724624 (2025). DOI: 10.3389/fchbi.2025.1724624

B-2) 国際会議のプロシーディングス他

N. HISHIKURA, A. HORIKAWA, K. KURASHIMA-ITO, R. OKUBO, R. WATANABE, P. M. SAYEESH, K. INOMATA, M. MISHIMA, T. MIKAWA, H. KOTEISHI, H. SAWAI, Y. SHIRO, T. IKEYA and Y. ITO, “A Dynamic Homodimer Structure of the Response Regulator FixJ from *Bradyrhizobium japonicum* in Its Phosphorylated State in Aqueous Solution,” *SSRN*, 6297199 (2026). DOI: 10.2139/ssrn.6297199

B-3) 総説、著書

Y. SHIRO, H. SAWAI and T. TOSHA, *Iron in Biology: Molecular Structures, Cellular Processes and Living Systems*, RSC book series (Coordination Chemistry Perspective) (2025). ISBN: 978-1-83767-440-4

I. YANATORI and H. SAWAI, “Introduction to Iron Dynamics in Human Cells: Fundamental Mechanisms and Their Updates,” in *Iron in Biology: Molecular Structures, Cellular Processes and Living Systems*, RSC book series (Coordination Chemistry Perspective), Chapter 1-1, 1–10 (2025).

H. SAWAI, H. SUGIMOTO and Y. SHIRO, “Iron Absorption in Human Duodenum by Dcytb and DMT1,” in *Iron in Biology: Molecular Structures, Cellular Processes and Living Systems*, RSC book series (Coordination Chemistry Perspective), Chapter 2-1, 73–88 (2025).

澤井仁美, 「生体鉄の分子科学: 鉄イオンとヘム鉄の生体内における動態と制御」, *人工血液*, **33**, 55–63 (2025).

B-4) 招待講演

澤井仁美, 「病原菌のヘム応答センサータンパク質の感知機能を特異的に『操る』抗菌薬の開発」, 第98回日本生化学会大会, 京都, 2025年12月.

H. SAWAI, “Heme sensing is a new target for antibiotic development,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), Honolulu (USA), December 2025.

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-).

生命金属科学研究会常任幹事 (2025-).

学会の組織委員等

第4回生命金属科学シンポジウムプログラム委員 (2025).

第49回日本鉄バイオサイエンス学会学術集会学術奨励賞審査員 (2025).

第98回日本生化学会大会若手優秀講演賞審査員 (2025).

14th International Vanadium Symposium, Organizing Committee (2025).

学会誌編集委員

Frontiers in Chemical Biology, Associate Editor (2025-).

理科教育活動

地域連携事業「化学セミナー」大阪公立大学 (2025).

高大連携事業「化学セミナー」大阪公立大学 (2025).

生涯学習公開講座「化学セミナー」大阪公立大学 (2025).

B-8) 大学等での講義、客員

大阪公立大学理学部, 「先端研究探索」, 「無機化学演習」, 2025年10月-.

大阪公立大学理学部, 「化学実験」, 「化学卒業研究」, 「化学海外卒業研究」, 2025年4月-.

大阪公立大学大学院理学研究科, 「化学特別演習」, 「研究企画ゼミナール」, 「プロポーザルディフェンス」, 「無機化学特論」, 2025年4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」, 2025年10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」, 2025年4月-.

奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科, 「物質科学特論B」, 2025年10月-.

Lund Institute of Advanced Neutron and X-ray Science (LINXS), LINXS Core Group Fellow, 2023年9月-2025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Fe²⁺ 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-2025年).

(公財) 上原記念生命科学財団研究助成, 「軟X線顕微鏡による生細胞内金属の可視化技術の革新」, 澤井仁美 (2026年-2027年).

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と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」を追跡するための新しい方法を確立したい。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~2025年3月31日)
(教授(クロスアポイントメント*)) (2025年4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:

- ランタノイド錯体の高励起状態のポテンシャルエネルギー曲面を記述する近似手法の開発
- 配糖化酵素による C- グリコシル化反応の選択性機構の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- 近年, 遷移金属錯体に続く光触媒として, ランタノイドの一種であるセリウム錯体が注目を集めている。望む機能を有するセリウム錯体の設計には, その機能発現機構の理解が不可欠である。しかし, セリウム系の励起状態のポテンシャルエネルギー曲面 (PES) の計算は困難であり, これまでほとんど検討されてこなかった。本研究では, セリウム錯体の低励起状態に加え, 高励起状態の PES を近似的に記述する手法 (イオンエネルギーシフト法) を開発した。本手法により, セリウム錯体の 4f-5d 励起状態や, 4f から配位子への電荷移動型励起状態の PES 上の重要な構造 (遷移状態や円錐交差点) の探索が可能になった。さらに, 機構解明とデータ駆動型の錯体設計の融合を目指し, セリウム錯体の構造や励起状態に関する計算データのデータベース化も進めている。
- 近年, 医薬品や機能性分子における C- 配糖体の重要性が高まり, 配糖化酵素を用いた C- グリコシル化反応が注目されている。特に糖転移酵素 GgCGT は, フロレチンに対して高い C- 配糖化選択性を示すが, その反応機構および選択性発現機構は未解明である。本研究では, GgCGT と UDP グルコースによる配糖化反応を対象に, 計算化学的手法を用いた機構解析を行った。その結果, 従来説とは異なり, 酵素残基ではなく, 糖供与体が塩基として機能する新たな機構を提案した。また, 従来説においてプロトンを引き抜くと考えられていたヒスチジンと, 隣接するアスパラギン酸の二残基が, C/O- 配糖体の選択性の鍵となることも見出した。

B-1) 学術論文

Y. OSADA, R. SATO, T. NISHIKAWA, M. TOKITA, T. KAMOSHIDA, T. MASUBUCHI, M. SHIBUTA, M. HATANAKA and A. NAKAJIMA, "From Si₁₆ to Ge₁₆: Geometric Origins of Robustness in Binary Cage Superatoms on Organic Substrates," *J. Phys. Chem. C* **130**(9), 3518–3525 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c07801

S. IKUTA, T. INAGAKI and M. HATANAKA, "An Approximate Method for Exploring Nonradiative Decay Pathways from Highly Excited States of Lanthanide Complexes: Application to Luminescent Cerium Complexes," *J. Comput. Chem.* **47**(5), e70327 (2026). DOI: 10.1002/jcc.70327

D. TERADA, T. INAGAKI and M. HATANAKA, "Mechanistic Origin of C- over O-Glycosylation in Glycosyltransferase GgCGT: A QM/MM Study," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **99**(2), uoag026 (2026). DOI: 10.1093/bulcsj/uoag026

T. INAGAKI and M. HATANAKA, “Comprehensive Molecular-Level Understanding of MgO Hydration through Computational Chemistry,” *J. Phys. Chem. C* **130**(3), 1312–1326 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c06767

D. TERADA, T. INAGAKI and M. HATANAKA, “Mechanistic Elucidation of Enzymatic C-Glycosylation: Facilitation by Proton Transfer to UDP-Glucose,” *RSC Adv.* **15**(35), 28592–28600 (2025). DOI: 10.1039/d5ra02643a

H. YAMADA, S. TAKASUKA, S. OIKAWA, Y. HARASHIMA, T. TAKAYAMA, A. NAG, A. WAKIUCHI, T. ANDO, T. SUGAWARA, M. HATANAKA, T. MIYAO, T. MATSUBARA, Y. OHNISHI, H. AJIRO and M. FUJII, “Multi-Objective Bayesian Optimization for Experimental Design in Copolymerization and Revealing Chemical Mechanism of Pareto Fronts,” *ACS Appl. Eng. Mat.* **3**(8), 2402–2415 (2025). DOI: 10.1021/acsaelm.5c00309

B-4) 招待講演

M. HATANAKA, “Theoretical and Data-Driven Approaches to Lanthanide Photofunctional Materials,” The 6th CSJ-TSC Joint Symposium “Precision Chemistry for a Sustainable Future: Carbon Neutrality, AI, and Healthcare,” Taichung (Taiwan), March 2026.

M. HATANAKA, “Development of Feature Descriptors for Machine Learning Guided Design of Functional Materials,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem2025), Honolulu (USA), December 2025.

M. HATANAKA, “Theoretical and Data-Driven Approaches to Lanthanide Photofunctional Materials,” Computational Modeling of Catalysis Symposium, Tianjin (China), October 2025.

M. HATANAKA, “Development of Feature Descriptors for Machine Learning Guided Design of Functional Materials,” The 28th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE28), Bangkok (Thailand), July 2025.

M. HATANAKA, “Theoretical and Data-Driven Approaches to Lanthanide Photofunctional Materials,” The 13th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2025), Oslo (Norway), June 2025.

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 (2022–2025).

日本化学会理論化学・情報化学・計算化学デビジョン幹事 (2025–).

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–).

文部科学省基礎研究振興部会委員 (2025–).

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 (2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

慶應義塾大学理工学部,「化学A」,「分子量子化学」,「物理化学演習第1」,「化学実験第1」,2025年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部,「量子化学基礎」,「電子状態理論」,「物理化学演習第2」,2025年10月–2026年1月.

慶應義塾大学大学院理工学研究科,「計算化学特論」,2025年10月–2026年1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」(代表者: 栄長泰明), 畑中美穂 (研究分担者) (2023年度–2025年度).

日本医療研究開発機構創薬基盤推進研究事業,「未開拓ケミカルスペースを狙う金属錯体創薬の基盤技術確立」(代表者: 野田秀俊), 畑中美穂 (研究分担者) (2025年度–2027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–2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

ランタノイド系の光機能の理解には, 励起状態のポテンシャルエネルギー曲面 (PES) の把握が不可欠である。しかし, 従来法であるエネルギーシフト (ES) 法では, ランタノイドの $4f-4f$ 励起状態および配位子の三重項励起状態の PES しか記述できなかった。これに対し, 2025 年度に新たに提案したイオンエネルギーシフト (IES) 法は, $4f-5d$ 励起や電荷移動 (CT) 型励起状態の記述を可能にする手法である。そのため, 本手法はセリウム系にとどまらず, 発光材料として広く用いられるユウロピウム系における CT 励起状態の役割の解析にも適用可能であると考えられる。このように, ES 法と IES 法を併用することで, 幅広いランタノイド光機能材料の理解と設計の進展が期待される。一方で, IES 法には励起エネルギーの明示的な計算が必要であるが, 代表的な励起状態計算法である TDDFT 法では, 定性的にも誤った結果を与える場合があるという問題が残されている。したがって, 大規模なランタノイド錯体に対して, 励起エネルギーおよび励起状態の性質を高精度に評価可能な計算手法の開発が喫緊の課題であると言える。

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～2026年3月31日)

佐野 雄二(特命専門員)

竹家 啓(特任准教授)

CASSOURET, Florent(特任研究員)

JAMBUNATHAN, Venkatesan(特任研究員)

LIM, Hwanhong(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)

YAHIA, Vincent(特別訪問研究員)

鈴木 昌世(特別訪問研究員)

角谷 利恵(特別訪問研究員)

殖栗 敦(特別訪問研究員)

田村 彰良(特別訪問研究員)

CONNOR, Elsa(インターンシップ)

ROBIN, H  linand(インターンシップ)

松田 美帆(技術支援員(派遣))

小林 純(技術支援員(派遣))

水嶋 一彦(技術支援員(派遣))

伊吹 剛(技術支援員(派遣))

正入木 由里絵(技術支援員(派遣))

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ンニクスの展開

A-3) 研究活動の概略と主な成果

分子科学に関連して重要な波長域にレーザーの高輝度光を展開する為の固体レーザー，非線形波長変換法につき包括的な研究を進めている。特には近年のマイクロ固体フォトンニクス [マイクロチップ Nd:YVO₄ レーザー (1990 年)，Yb:YAG レーザー (1993 年)，セラミックレーザー (1997 年)，バルク擬似位相整合 (QPM) 素子：大口径周期分極反転 MgO:LiNbO₃ (PPMgLN) (3mm 厚 2003 年，5mm 厚 2005 年，10mm 厚 2012 年)] を先導すると共に，共同研

究を通し赤外域分子分光などにその展開を図っている。国際誌の雑誌編集，特集号企画から国際シンポジウム・会議の企画提案，開催に積極的に参加する事でその成果を内外に発信している。

- a) マイクロドメイン構造，界面（粒界面，結晶界面，さらには自発分極界面）を微細に制御する固相反応制御法の研究として，レーザーセラミックス，レーザー素子，分極反転素子の作製プロセスの高度化を図っている。特に，固体レーザーの発光中心である希土類イオンの軌道角運動量を利用したマイクロドメインの配向制御は，これまで不可能だった異方性セラミックスによるレーザー発振を成功させただけでなく原理的にはイオンレベルでの複合構造を可能とする。さらに最近，表面活性接合による異種材料接合に成功し，Distributed Face Cooling (DFC) 構造による Tiny Integrated Laser (TILA) なる次世代の高性能な高集積小型レーザーに関するコンセプトが検証された。これより，新たなフォトニクスを創出できるものと期待している。
- b) 光の発生，増幅，変換の高度制御を可能とする為の研究として，希土類イオンの発光・緩和機構の解明，固体中の光，エネルギー伝搬，さらにはマイクロドメイン構造と光子及び音子の相互作用機構解明，非線形光学過程の解明，モデル化を進めている。Yb レーザーの機構解明，Nd レーザーの直接励起可能性，希土類レーザーの励起光飽和特性，YVO₄ の高熱伝導率特性の発見，実証に繋がったばかりでなく，マイクロ共振器の高輝度効果，レーザー利得と非線形光学過程の量子相関などの興味深い展開も見せている。特にレーザー科学発展の中で生じたパルスギャップ領域であるサブナノ秒からピコ秒の便利な光源開拓に関する貢献，パルスギャップレーザーによる新現象の解明などが期待できる。
- c) 開発した光素子を用いた新規レーザー，波長変換システムの開発と展開を図っている。これまでもエッジ励起セラミック Yb:YAG マイクロチップレーザーによる高平均出力動作，手のひらサイズジャイアントパルスマイクロチップレーザーからの高輝度温度光発生，マイクロチップレーザーからの UV 光（波長：266 nm）からテラヘルツ波（波長：100～300 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トニクスで実証した。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と幅広い展開が期待される。

B-1) 学術論文

Y. SATO, A. KAUSAS and T. TAIRA, “Enhanced Thermal Conductivity of Distributed Face-Cooled Composite Laser Medium Included Thermal Resistance at the Bonding Interface,” *Opt. Express* **33(11)**, 24039–24049 (2025). DOI: 10.1364/OE.554536

Y. SATO and T. TAIRA, “Augmented Spectrum Bandwidth of Nd-Doped Garnet and Bixbyite by Spectrum Tailoring,” *Opt. Express* **33(11)**, 24050–24059 (2025). DOI: 10.1364/OE.554538

T. TAIRA, J. HAYASHI, N. PAVEL and T. SUZUKI, “Tiny Integrated Lasers and Their Application to Industrial Laser Technologies: Feature Issue Introduction,” *Opt. Express* **33(15)**, 31204–31210 (2025). DOI: 10.1364/OE.571207

- Y. SATO, T. TAIRA and T. TAKEMASA**, “Thermal Conductivity of Transparent Y_2O_3 , YAG, YSAG, and YGAG Ceramics Compared to YAG and Sapphire Single Crystals,” *Opt. Express* **33**(25), 53501–53514 (2025). DOI: 10.1364/OE.576716
- Y. MIZUTA, T. KATO, S. TAMAKI, T. HOSOKAI, T. TAIRA, Y. SAKINO and Y. SANO**, “Fatigue Strength Enhancement of Structural Members *via* In Situ Laser Peening Using TILA for Service Life Extension,” *Opt. Express* **33**(24), 51184–51191 (2025). DOI: 10.1364/OE.576425
- K. HIROSAWA, A. KAUSAS, V. YAHIA, H. ODAKA, F. CASSOURET, N. OHATA and T. TAIRA**, “High-Energy, Strong-Field Deep-Ultraviolet Based Joule-Class Amplifier with Distributed-Faced-Cooling Chips,” *Opt. Lett.* **50**(24), 7456–7459 (2025). DOI: 10.1364/OL.581191
- F. CASSOURET, S. RAISSI, P. LOISEAU, J. DEBRAY, P. SEGONDS, T. TAIRA and G. AKA**, “Nonlinear Characterization of $\text{Ca}_5(\text{BO}_3)_3\text{F}$ (CBF) for Third Harmonic Generation at 355 nm,” *J. Alloy. Compd.* **1050**, 185704 (2025). DOI: 10.1016/j.jallcom.2025.185704
- N. MAHARJAN, Y. MIZUTA, K. MASAKI, S. TAMAKI, Y. SANO, T. HOSOKAI and A. ANG**, “Improving Fatigue Behaviour of Additively Manufactured Scalmetalloy® Using Laser Shock Peening,” *J. Mater. Res. Technol.* **37**, 3424–3433 (2025). DOI: 10.1016/j.jmrt.2025.07.033

B-2) 国際会議のプロシーディングス他

- K. HIROSAWA, N. OHATA, H. ODAKA, A. KAUSAS, V. YAHIA and T. TAIRA**, “Generation of High-Energy Laser Pulses at 266 nm with Sub-Nanosecond Pulse Duration and 20 Hz Repetition Rate,” *CLEO/Europe-EQEC 2025*, CA-6.6 (2025). DOI: 10.1109/CLEO/Europe-EQEC65582.2025.11110255
- F. CASSOURET, S. RAISSI, P. LOISEAU, J. DEBRAY, P. SEGONDS, T. TAIRA and G. AKA**, “Nonlinear Characterization of $\text{Ca}_5(\text{BO}_3)_3\text{F}$ (CBF) for Third Harmonic Generation at 355 nm,” *2025 Optica Nonlinear Optics Topical Meeting (NLO)*, M3B.1 (2025). ISBN: 978-1-957171-49-4
- F. CASSOURET, Y. SATO and T. TAIRA**, “Thermal Properties and Structural Analysis of Room Temperature Bonded Cr:LiSAF/Sapphire Chip Stacks,” *Advanced Solid State Lasers Conference (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2025*, JTU2A.6. (2025). DOI: 10.1364/ASSL.2025.JTu2A.6
- Y. SATO and T. TAIRA**, “Rotating Magnetic Flux Generator for Crystalline Orientation Control and Improved Alignment of Grains in Yb:FAP Ceramics,” *Advanced Solid State Lasers Conference (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2025*, JTU2A.11. (2025). DOI: 10.1364/ASSL.2025.JTu2A.11
- Y. SATO, T. TAIRA and T. TAKEMASA**, “Thermal Conductivity of YSAG, YGAG, YAG, and Y_2O_3 Ceramics Compared to YAG and Sapphire Single Crystals,” *Advanced Solid State Lasers Conference (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2025*, JTU2A.12. (2025). DOI: 10.1364/ASSL.2025.JTu2A.12
- V. YAHIA, H. ODAKA, M. YOSHIDA and T. TAIRA**, “5J, 8GW Pulses from a Room-Temperature DFC Power Chip Laser,” *Advanced Solid State Lasers Conference (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2025, Prague Congress Centre*, JW2A.18. (2025). DOI: 10.1364/ASSL.2025.JW2A.18
- F. CASSOURET, H. ROBIN, D. BALITSKI, S. RAISSI, P. LOISEAU, G. AKA and T. TAIRA**, “Nonlinear Characterizations of $\text{YAl}_3(\text{BO}_3)_4$ Crystals for Frequency Conversion in Green and UV Ranges,” *Advanced Solid State Lasers Conference (ASSL), Optica Laser Congress & Exhibition 2025*, ATH3A.1. (2025). DOI: 10.1364/ASSL.2025.ATH3A.1

F. CASSOURET, Y. SATO and T. TAIRA, “Bonding Interface Analysis and Thermal Properties of Cr:LiSAF/Sapphire Composite Chips,” *SPIE Photonics West 2026, Solid State Lasers XXXV: Technology and Devices*, 1387309 (2026). DOI: 10.1117/12.3079507

B-3) 総説, 著書

平等拓範, 「常温接合 DFC パワーチップによる小型集積レーザー」, 特集 溶接学会誌, **94(4)**, pp. 191–195 (2025). DOI: 10.2207/jjws.94.191

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

T. TAIRA, “DFC-chip Tiny Integrated Laser,” The 11th Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2025), OPIC 2025, Yokohama (Japan), April 2025.* (Keynote)

G. AKA, S. RAISSI, F. CASSOURET, P. LOISEAU, T. TAIRA, P. SEGONDS, B. BOULANGER and A. PISCH, “Recent progress on nonlinear borate single crystals for the design of solid-state laser in the UV range,” The 11th Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2025), OPIC 2025, Yokohama (Japan), April 2025.

V. YAHIA, A. KAUSAS, H. ODAKA and T. TAIRA, “DFC-PowerChip-Based Multi-Joule Laser Operated up to 50 Hz at Room Temperature,” The 11th Tiny Integrated Laser and Laser Ignition Conference (LIC 2025), OPIC 2025, Yokohama (Japan), April 2025.

T. TAIRA, “Tiny Integrated Power Chip towards Extreme High Density Power Laser,” The 13th Asia-Pacific Laser Symposium 2025, Seogwipo KAL Hotel, Jeju (Korea), May 2025.

平等拓範, 「小型集積パワーチップレーザー」, レーザー学会夏季講演会「パワーレーザーが拓く新たな産業応用」, マイドームおおさか, 大阪, 2025 年 7 月.

T. TAIRA, “Tiny Integrated Laser for Long and Short Double Pulse LIBS,” The 10th Symposium on Applications of Advanced Measurement Technologies (SAAMT)2025, AOSSA, Tokushima (Japan), September 2025.* (Keynote)

平等拓範, 「DFC パワーチップレーザー熱問題の検討」, レーザー学会第 601 回&602 回研究会報告, 宮崎婦人会館, 宮崎, 2025 年 10 月.

平等拓範, 「ギガワット小型集積レーザー展望」, 第 44 回電子材料シンポジウム (EMS-44), グランドメルキュール奈良 橿原, 奈良, 2025 年 10 月.

平等拓範, 「小型集積レーザー: 極限への挑戦とスピニアウト」, JST 未来社会創造事業「レーザー駆動による量子ビーム加速器の開発と実証」シンポジウム, オンライン開催, 2025 年 11 月.

B-6) 受賞, 表彰

T. TAIRA, Research.com Engineering and Technology in Japan, Leader Award (2025).

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–), 副代表幹事 (2024–).

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–).

光エレクトロニクス産学連携専門委員会学会委員長 (2025–).

学会の組織委員等

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

“*Tiny Integrated Lasers and Their Application to Industrial Laser Technologies (TILA-LIC 2025)*,” *Feature Issue in Optics Express*, Lead Editor (2025).

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」 (代表者: 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).

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」 (② a.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).

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」 (代表者: 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).

宇宙航空研究開発機構宇宙戦略基金, 「高出力レーザの宇宙適用による革新的衛星ライダー技術」 (代表者: 野田 進), 「フォトリック結晶レーザと固体結晶融合による革新的衛星ライダー技術の開発」, 平等拓範 (研究分担者) (2025 年度–2026 年度).

B-11) 産学連携

共同研究, トヨタ自動車(株), 「量子光学センサーの研究」, 平等拓範 (2025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-2025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-2025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ニ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による固液界面の構造解析法
- b) 電極／電解液界面設計による革新型エネルギー変換反応の研究
- c) 電気化学走査プローブ顕微鏡データの解析によるハイスループット解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 固体と液体の界面で起きる特異な現象を解析できる走査プローブ顕微鏡を構築し，潤滑油と金属の界面およびアルコールとグラファイトの界面について物性解明を進めた。まず，潤滑油中で，ステアリン酸が酸化銅表面に形成する金属石けん膜を直接観察し，その特性を解析した。金属石けん膜は速やかに厚く形成され，しかも機械的に除去されにくいことが分かった。また，自己組織化によって形成された金属石けん膜は，ステアリン酸単分子膜よりも低い摩擦を示し，純粋な銅ステアレート膜と同程度の優れた境界潤滑性能を示した。つまり，水分が脂肪酸の脱プロトン化と銅との配位を助け，厚くて滑る膜の形成を促進するということを明らかにした。また，大西 洋教授との共同研究において，氷点下の固液界面で計測可能な走査プローブ顕微鏡システムを用いて，グラファイト表面に吸着したオクタノール分子が形成する構造をナノメートル分解能で観察し，さらに，表面上にオクタノール層が形成されていることを示した。低温では液体の粘度上昇によって探針カンチレバーの共振特性が変化するものの，氷点下の液中においても安定した測定が可能であることを実証した。
- b) 次世代の革新型蓄電池であるフッ化物イオンシャトル電池二次電池では，キャリアイオンであるフッ化物イオンが電解液に溶けず，有機物のアニオンアクセプターを加えることで，フッ化物イオンの濃度を高めていた。本研究では，アニオンアクセプターを用いることなく，安定で安価な無機物であるテトラフルオロほう酸カリウムを加えることで，フッ化物イオンの濃度を高め，さらにフッ化物が反応しやすい電解液を調製できる事を初めて示した。これらの結果を基に，フッ化物イオンの活性を調整するという新しいコンセプトの電解液を設計する方針を提案した。
- c) 電気化学走査プローブ顕微鏡の測定は，計測速度や反応速度が遅く測定に長時間を要する場合がある。このような系において，効率的に研究を進めるために，実験条件，得られた画像データ，電気化学データの相関を解析することで，これまでよりも高速に解析を進めることが出来る技術を構築した。さらに，画像解析によって人間の目だけでは気付くことが出来ない特徴の抽出，電気化学データの低次元化解析によるハイスループット解析を可能とする技術を構築し，蓄電池の反応解析に応用した。

B-1) 学術論文

N. TABTIMTONG, P. KAISOOK, Y. IMAI, T. UEDA, K.-I. NAKAMOTO, Y. SEGAWA, A. NERAMITTAPONG, S. NERAMITTAPONG and T. MINATO, “Facilitated Fluorination by Potassium Tetrafluoroborate in Tetraglyme Electrolytes for Fluoride Shuttle Batteries,” *ACS Appl. Energy Mater.* **9(7)**, 3690–3696 (2026). DOI: 10.1021/acsaem.5c04132

N. YAMASHITA, H. EGAWA, T. HIRAYAMA and T. MINATO, “In-Lubricant AFM Visualization of Fatty Acid Metal Soap Films: Evaluation of Tribological Properties,” *Tribol. Int.* **215(B)**, 111471 (2026). DOI: 10.1016/j.triboint.2025.111471

J. NISHIDA, K. OTSUKA, T. MINATO, Y. K. KATO and T. KUMAGAI, “Ultrafast Infrared Nano-Imaging of Local Electron–Hole Dynamics in CVD-Grown Single-Walled Carbon Nanotubes,” *Sci. Adv.* **11(25)**, eadv9584 (2025). DOI: 10.1126/sciadv.adv9584

Z. LU, R. YANAGISAWA, S. MORIGUCHI, T. UEDA, K. NAKAMOTO, T. MINATO and H. ONISHI, “Frequency-Modulation AFM in Sub-Zero Antifreeze Liquid,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **64(5)**, 05SP05 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/adcccc

N. TABTIMTONG, A. PADUNGWAT, N. LERTNA, P. ATHIKAPHAN, A. NERAMITTAPONG, T. MINATO and S. NERAMITTAPONG, “Sucrose Conversion to 5-Hydroxymethylfurfural over Commercial Ion-Exchange Resin,” *Biomass Bioenergy* **199**, 107940 (2025). DOI: 10.1016/j.biombioe.2025.107940

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

T. MINATO, “Energy Conversion at Electrode–Electrolyte Interfaces: Insights from Scanning Probe Microscopy,” Annual Meeting of the Japan Society of Vacuum and Surface Science 2025, Tsukuba, October 2025.

佐藤宏祐, 斎藤 晃, 湊 丈俊, 杉本敏樹, 「担持金属助触媒の役割解明に向けた光触媒表面の in-situ/operando 分光・顕微観測」, 日本表面真空学会 第 8 回若手部会研究会 & 関東支部 10 周年記念シンポジウム, 新潟, 2025 年 4 月.

湊 丈俊, 「原子間力顕微鏡を用いた固液界面のナノ力学計測」, 分子研研究会「トライボロジーの分子科学」, 岡崎, 2025 年 4 月.

T. MINATO, “Exploring the Hidden World at Battery Interfaces: Toward the Energy Technology of Tomorrow,” Cambodian Chemical Society International Symposium, Phnom Penh (Cambodia), December 2025.*

T. MINATO, “Reaction Mechanism in Rechargeable Batteries for Next-Generation Energy Technology,” The 34th Thai Institution of Chemical Engineering and Applied Chemistry International Conference, Pattaya (Thailand), May 2025.

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–).

Applied Surface Science Division, International Union for Vacuum Science, Technique and Applications (IUVSTA)-Japan, Chair (2025–).

日本表面真空学会 国際連携委員会委員 (2023–).

次世代ナノプローブ技術委員会運営委員 (2024–).

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–).

学会の組織委員等

International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '26, Program Committee (2021–).

ICSPM 国際会議プログラム委員 (2021–).

The 34th Thai Institution of Chemical Engineering and Applied Chemistry International Conference, International Scientific Committee (2024–2025).

The 26th International Conference on Non-Contact Atomic Force Microscopy, Program Committee (2025–2026).

ACSIN16 国際会議実行委員会プログラム委員 (2025–).

理科教育活動

愛知県サイエンス実践塾体験研究室「未来の物理化学研究者集まれ！ 2050年のモビリティエネルギーのナゾに迫る！」愛知県×分子研×トヨタ自動車 (2025).

令和7年度文部科学省マテリアルリサーチインフラ事業学生研修プログラム「走査プローブ顕微鏡を用いたナノレベル物性解析」(2025).

その他

青森県三戸町ふるさと応援大使 (2021–2025).

B-10) 競争的資金

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

Z. LI, S. TAO, M. ADDICOAT, T. NAKAMURA and D. JIANG, “Synthesis of Covalent Organic Frameworks *via* Coupling Polymerization,” *Nat. Synth.* **5**, 199–208 (2026). DOI: 10.1038/s44160-025-00895-4

T. FUJINO, M. HISHIDA, M. ITO, T. NAKAMURA, M. ASADA, N. KURAHASHI, H. KIUCHI, Y. HARADA, K. HARANO, R. MAKIURA, K. J. TAKENO, S. YOKOMORI, H. OIKE and H. MORI, “Macroscopic Structural Transition of Nickel Dithiolate Capsule with Uniaxial Magnetic Anisotropy in Water,” *Adv. Sci.* **12**, 2504967 (2025). DOI: 10.1002/advs.202504967

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–).

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 (2023–2027).

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 (2023–2029).

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 (2024–2027).

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

M. KATO, F. NAKASHIMA, N. OHTSUKA, Y. NISHIOKA, A. IZUMISEKI, T. FUJINAMI, S. OISHI, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Data-Integrated Elucidation of Structure–Activity Relationships toward the Rational Design of Perfluoriodoarene-Based Halogen-Bond Donor Catalysts,” *J. Org. Chem.* **91**(5), 2088–2104 (2026). DOI: 10.1021/acs.joc.5c02704

N. OHTSUKA, M. Z. MOHD ARIS, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Data-Guided Rational Design of Additives for Halogenation of Highly Fluorinated Naphthalenes: Integrating Fluorine Chemistry and Machine Learning,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **28**, 6917–6927 (2026). DOI: DOI: 10.1039/d5cp03554f

K. TAKEDA, N. OHTSUKA, T. SUZUKI and N. MOMIYAMA, “Machine Learning-Guided Synthesis of Prospective Organic Molecular Materials: An Algorithm with Latent Variables for Understanding and Predicting Experimentally Unobservable Reactions,” *Artif. Intell. Chem.* **3**(2), 100096 (2025). DOI: 10.1016/j.aichem.2025.100096

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」(代表者: 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。主認証システムの近代化改修を一通り終え，現在は次期 ORION である ORION2027（仮）に向け自然科学研究機構において構築が始まっている統合認証基盤構築との整合性を含め次世代でも通用する認証基盤の検討を行っている。
- 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，機構として導入を行った脆弱性検査システムについてその導入を主導すると共に，現在のリアクティブな体制からプロアクティブな体制へ移行するための基礎を構築した。現在，ORION2027 においても本取り組みを継続発展できるような調査・検討を行っている。
- c) a), b) についてより効果的な利活用が行えるように AI の適用について効果的に活用できる分野がわかってきており，段階的に実システムに対して適用を開始している。

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 (2024–2026).

大学共同利用研セキュリティワークショップ「岡崎 3 機関における最近の取組について」(2026).

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に参画している。

また、機構情報セキュリティ監査責任者として機構の全ての機関に導入を主導し脆弱性検査システムを活用したプロアクティブなサイバーセキュリティ体制の構築・運用や、ORION2027 に向け 2032 年初頭においても可能な限り陳腐化を抑えられるシステム構成や開発、運用について調査検討を行っている。特に AI の利活用に関し、効率的でかつ段階的に実システムへ実装を行う方法もあわせて検討している。

技術推進部及び安全衛生管理室

B-1) 学術論文

K. HARADA, A. SAKAI, S. TSUNEKAWA, Y. TAKAKI, M. NAGASAKA, H. YUZAWA, K.-H. WANG, T. INA, H. KONDOH and M. YOSHIDA, “Improved Water Electrolysis Over Cobalt Oxyhydroxide by Carbonate Anion Adsorption: Direct Observation of Active Species Using Operando Hard/Soft X-Ray Absorption Spectroscopy,” *ChemSusChem* **18**(16), e202500559 (8 pages) (2025). DOI: 10.1002/cssc.202500559

C. O. M. MARIANO, K. H. CHEN, J. SHIUE, H. YUZAWA, T. ARAKI, K. T. ARUL, C. L. DONG, T. Y. YUNG, S. C. HSU, X. CAI, S. H. HSIEH and C. H. CHUANG, “Hexagonal BN Membranes Formation by Liquid-Phase Synthesis: Insights from Scanning Transmission X-Ray Microscopy,” *APL Mater.* **13**(10), 101118 (12 pages) (2025). DOI: 10.1063/5.0289068

H. IWAYAMA, H. YUZAWA and M. NAGASAKA, “Phase-Dependent Intermolecular Interactions of Nematic Liquid-Crystal Molecules Probed by Carbon K-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy,” *Phys. Rev. E* **113**(1), 015413 (6 pages) (2026). DOI: 10.1103/17pr-b3wv

G. GERMER, K. RAJES, T. OHIGASHI, H. YUZAWA, N. KOSUGI, R. FLESCHE, R. HAAG, F. RANCAN, A. VOGT and E. RÜHL, “Release of Rapamycin from Core-Multishell Nanocarriers Topically Applied on Ex Vivo Human Skin Probed by Scanning Transmission X-Ray Microscopy,” *Eur. J. Pharm. Biopharm.* **223**, 115038 (9 pages) (2026). DOI: 10.1016/j.ejpb.2026.115038

M. ODELIUS, S. D. FOLKESTAD, T. SAISOPA, Y. RATTANACHAI, W. SAILUAM, H. YUZAWA, N. KOSUGI, A. C. PAUL, H. KOCH and DE. CÉOLIN, “Symmetry Breaking around Aqueous Ammonia Revealed in Nitrogen K-Edge X-Ray Absorption,” *J. Phys. Chem. Lett.* **16**(14), 3411–3419 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpclett.4c03625

F. KAGAYA, N. SAITO, Y. MINAMIDA and K. AMITA, “Study on Neutralization of Tamagawa Acidic Water Using Iron and Steel Slags,” *Zairyo/Journal of the Society of Materials Science, Japan*, **74**(4), 267–272 (2025). DOI: 10.2472/jsms.74.267

Y. OKA, F. QUINTES, Y. YOSHIKAWA, M. FUJIWARA, K. MAEDA, S. WEBER and K. INOUE, “Direct Observation of Long-Lived Radical Pair between Flavin and Guanine in Single- and Double-Stranded DNA-Oligomers,” *Commun. Chem.* **8**(1), 203 (2025). DOI: 10.1038/s42004-025-01596-x

Y. MINAMIDA, E. TACHIBANA, F. KAGAYA, N. SAITO, K. SUGIMOTO, Y. YAMAGISHI and H. MATSUURA, “Chemotaxonomic Analysis of *Laurencia* spp. Collected from the Coast of Akita Prefecture, Japan. Part I: Chemical Composition of *L. venusta* and *L. okamurae*,” *Biochem. Syst. Ecol.* **124**, 105172 (2026). DOI: 10.1016/j.bse.2025.105172.

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)

- A. MATSUMOTO, K. NAKAGAWA, T. NAKANISHI, A. SEKINE, S. KOJO, M. KIRA, S. SATO, N. SHIBATA and T. ASAH***, “How Temperature Change Affects the Lattice Parameters, Molecular Conformation, and Reaction Cavity in Enantiomeric and Racemic Crystals of Thalidomide,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(14), 11988–11997 (2025). DOI: 10.1021/jacs.4c18394
- Y. NODA, N. KATO, F. SATO, Y. SUZUKI, S. TSUBOTA, H. KITAI, S. KOMATSU, A. TANAKA, Y. SATO, K. MAEDA, K. FURUHASHI, T. ISHIMOTO, T. KOSUGI, T. YAMAGUCHI, S. NAGAO, Y. KAMIYA, K. KADOMATSU, H. ASANUMA and S. MARUYAMA**, “Ameliorative Effect of an Anti-MicroRNA-21 Oligonucleotide on Animal and Human Models of Cystic Kidney Disease,” *Kidney360* **6**(6), 900–913 (2025). DOI: 10.34067/KID.0000000771
- R. TANIFUJI, E. HOSONO, H. KAMAKURA, Y. MURAMATSU, S. YOSHIDA, S. SATO, Y. OHASHI, S. DAN, H. SEIMIYA and H. OGURI**, “Strategic Scaffold Redesign of Ecteinascidins: An Approach for Generating Anticancer Macrocycles,” *Chem* **11**(11), 102664 (2025). DOI: 10.1016/j.chempr.2025.102664
- K. SUZUKI, D. ASAI, R. J. HERMAN, S. W. NJORGE, S. YOSHIDA, S. SATO, S. LEE and K. TAHARA**, “Synthesis, Structures, and Properties of Dehydrobiphenyleno[12]Annulenes: Carbon-Rich Compounds Comprising Two Different Antiaromatic Units,” *Chem. –Asian J.* **20**(18), e00754 (2025). DOI: 10.1002/asia.202500754
- H. MIURA, M. CHIDA and T. SHISHIDO**, “C3-Selective C–H Borylation of Indoles by Supported Gold Catalysts,” *Tetrahedron Lett.* **171–172**, 155758 (2025). DOI: 10.1016/j.tetlet.2025.155758
- Z. WEI, Y. KAMIYA, B. DING, T. SATO, T. HAYASHI, H. MIURA and T. SHISHIDO**, “Design of Supported Metal/Metal Oxide Catalysts for Low-Temperature Ethanol Production by CO₂ Hydrogenation,” *Appl. Catal., A* **708**, 120586 (2025). DOI: 10.1016/j.apcata.2025.120586
- K. NOMOTO, Y. OKUZUMI, T. NAKAGAWA, H. MIURA and T. SHISHIDO**, “Low-Temperature CO₂ Hydrogenation to Methanol on Cu-Doped Au/ZrO₂: Effect of Cu Doping on Hydrogen Activation,” *Catal. Today* **462**, 115573 (2025). DOI: 10.1016/j.cattod.2025.115573
- X. TIAN, M. WANG, X. MA, S. SATO and Z. SUN**, “Nor[7]circulenyl Neutral Radical and Its Charged Species: Synthesis, Structures, and Efficient NIR-II Photothermal Conversion for Imaging and Laser Ignition,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**, e202520605 (2025). DOI: 10.1002/anie.202520605
- H. MIURA, K. AMEYAMA, Y. SATO and T. SHISHIDO**, “Regioselective Carbosilylation of Allenes by Supported Au Catalysts,” *J. Org. Chem.* **90**(43), 15285–15292 (2025). DOI: 10.1021/acs.joc.5c01882
- T. ITO, M. FUKAYA, R. SAWA, M. HIRABAYASHI, Y. YANO, S. YOSHIDA, S. SATO, N. ADACHI, Y. YAMADA, Y. KUBOTA, K. HAYASHI, K. RYU, T. KAWAHARA and M. IINUMA**, “Structural Elucidation and Virucidal Properties of Resveratrol Octamers Isolated from *Vatica albiramis*,” *J. Nat. Med.* **80**(1), 26–31 (2026). DOI: 10.1007/s11418-025-01986-4
- S. MURAKAMI, T. HONDA, T. FUSHIKI, S. YOSHIDA, S. SATO, N. TORIUMI, M. UCHIYAMA and H. OGURI**, “Dynamic Covalent Platform for Chiroptically Tunable Figure-Eight Macrocycles from Preorganized Alkaloidal Scaffolds,” *JACS Au* **6**(2), 1089–1101 (2026). DOI: 10.1021/jacsau.5c01493
- R. KAINUMA, K. MATSUMOTO, T. ITO and T. SATOH**, “Sub-Millimeter Propagation of Antiferromagnetic Magnons *via* Magnon–Photon Coupling,” *npj Spintron.* **2**, 31 (2024). DOI: 10.1038/s44306-024-00034-3

- T. TATEISHI, A. KATO and J. KISHINE**, “Electron–Chiral Phonon Coupling, Crystal Angular Momentum, and Phonon Chirality,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **94**(5), 053601 (5 pages) (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.053601
- K. MIKUNI, T. HIRAOKA, T. KURAMOTO, Y. FUJII, A. KOREEDA, S. PARCHENKO, A. STUPAKIEWICZ and T. SATOH**, “Magnetic Resonance Frequency of Two-Sublattice Ferrimagnet with Magnetic Compensation Temperature,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **94**(11), 111001 (9 pages) (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.111001
- H. WATANABE, R. OIWA, G. KUSUNO, T. SATOH and R. ARITA**, “Symmetry Analysis of Cross-Circular and Parallel-Circular Raman Optical Activity,” *Phys. Rev. B* **112**(11), 115105 (2025). DOI: 10.1103/45jq-j23c
- D. M. JURASCHEK, R. M. GEILHUF, H. ZHU, M. BASINI, P. BAUM, A. BAYDIN, S. CHAUDHARY, M. FECHNER, B. FLEBUS, G. GRISSONNANCHE, A. I. KIRILYUK, M. LEMESHKO, S. F. MAEHRLEIN, M. MIGNOLET, S. MURAKAMI, Q. NIU, U. NOWAK, C. P. ROMAO, H. ROSTAMI, T. SATOH, N. A. SPALDIN, H. UEDA and L. ZHANG**, “Chiral Phonons,” *Nat. Phys.* **21**(10), 1532–1540 (2025). DOI: 10.1038/s41567-025-03001-9
- T. ARAKAWA, H. SHOJI, Y. SHIMAMOTO, Y. KOUZAKA, J. OHE, S. KON and Y. TOGAWA**, “Visualizing the Polarization of Collective Magnetic Excitations in the Chiral Helimagnet CrNb_3S_6 by Microwave Circular Dichroism Spectroscopy,” *Phys. Rev. Appl.* **24**(4), 044017 (2025). DOI: 10.1103/vl98-dfjb
- M. KUNIMI, Y. KATO and H. KATSURA**, “Systematic Construction of Asymptotic Quantum Many-Body Scar States and Their Relation to Supersymmetric Quantum Mechanics,” *Phys. Rev. Res.* **7**(4), 043107 (2025). DOI: 10.1103/zstl-s1y2
- H. MUNEKATA, G. KUSUNO, K. MIYAZAKI and T. SATOH**, “Polarization-Dependent Photocurrent in a Quadrilateral-Shaped Bulk Crystalline Tellurium Chip with Near-Infrared Light Excitation,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **64**(11), 113002 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/ae14c7
- I. G. BOSTREM, A. S. OVCHINNIKOV, M. S. MALYUTIN, E. G. EKOMASOV and J. KISHINE**, “Whitham’s Theory of Envelope Solitary Waves in a Monoaxial Chiral Helimagnet,” *Phys. Rev. B* **112**(22), 224422(2025). DOI: 10.1103/fxcd-trqv
- S. IWATA, Y. KANO and H. MATSUZAWA**, “Is Counterpoise Method a Proper Procedure for Evaluating the Dispersion Energy?” *J. Comput. Chem.* **47**(1), e70292 (2026). DOI: 10.1002/jcc.70292
- K. MIWA, T. OKAMOTO, Y. KOBORI and A. ISHIZAKI**, “Influence of Molecular Orientation and Exciton Transfer Rates on Solid-State Triplet–Triplet Annihilation Photon Upconversion,” *J. Phys. Chem. C* **129**(28), 12904–12915 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c02994
- S. KIMURA**, “Dirac Fermions Meet Kondo Lattice,” *Newton* **2**(2), 100329 (2026). DOI: 10.1016/j.newton.2025.100329
- Y. CHEN, A. MELÉNDEZ-SANS, S. KIMURA, L. H. TJENG and S. G. ALTENDORF**, “Epitaxial YbN Thin Films Grown by Nitrogen Plasma-Assisted Molecular Beam Epitaxy,” *Phys. Rev. Mater.* **9**(12), 123403 (2025). DOI: 10.1103/chf5-cc7n
- K. NISHIHARA, H. WATANABE, T. NAKAMURA and S. KIMURA**, “Evaluation of Space-Charge Effect of Low-Energy Pulsed Electron Beam for Time-Resolved Resonant Electron Energy-Loss Spectroscopy (TR-rEELS),” *Rev. Sci. Instrum.* **97**(1), 013303 (2026). DOI: 10.1063/5.0298870
- M. NAITO, M. TSUKAMOTO, K. GONNAI, H. TAKAYA, S. MIYAGAWA, T. SAKAGUCHI and T. HASHIMOTO**, “Synthesis, Structure and Solid State Emission Properties of 6-Alkoxyalicyclic aldehyde Azines,” *J. Mol. Struct.* **1329**, 141322 (2025). DOI: 10.1016/j.molstruc.2025.141322

- 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**(1), 1367 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-56381-0
- 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**(1), 3758 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-59032-6
- I. NODA, S. IKI and K. NARUSE**, “From Red Tides to Healthy Ecosystems by Nutrient Management in Enclosed Sea Areas,” *ACS ES&T Water* **5**(11), 6624–6632 (2025). DOI: 10.1021/acsestwater.5c00679
- M. KOYAKKAT, T. ISHIDA, K. FUJITA and H. SHIROTA**, “Low-Frequency Spectra of Hydrated Ionic Liquids with Kosmotropic and Chaotropic Anions,” *J. Phys. Chem. B* **128**(17), 4171–4182 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c01255
- E. FERRARI, H. UEDA, D. FAINOZZI, T. OSAKA, F. BENCIVENGA, M. BURIAN, P. CARRARA, J. VILA-COMAMALA, R. CUCINI, C. DAVID, A. GESSINI, S. GERBER, A. GOLOBORODKO, A. HRABEC, I. INOUE, Y. INUBUSHI, L. M. DINIZ LEROY, R. MINCIGRUCCI, E. PARIS, B. PEDRINI, B. ROESNER, J. R. ROUXEL, C. SERRAT, V. SCAGNOLI, K. TONO, M. YABASHI, J. YAMADA, K. YAMAMOTO, M. C. ZDORA, M. BEYE, C. MASCIOVECCHIO, M. CHERGUL, U. STAUB and C. SVETINA**, “All Hard X-Ray Transient Grating Spectroscopy,” *Commun. Phys.* **8**(1), 257 (2025). DOI: 10.1038/s42005-025-02178-y
- A. GREWAL, H. IMADA, K. MIWA, M. IMAI-IMADA, K. KIMURA, R. JACULBIA, K. KUHNKE, K. KERN and Y. KIM**, “Single-Molecule Phosphorescence and Intersystem Crossing in a Coupled Exciton Plasmon System,” *ACS Nano* **19**(26), 23796–23805 (2025). DOI: 10.1021/acsnano.5c04193
- G. EMPERAUGER, M. QIAO, G. BORNET, C. CHEN, R. MARTIN, Y. T. CHEW, B. GÉLY, L. KLEIN, D. BARREDO, A. BROWAEYS and T. LAHAYE**, “Benchmarking Direct and Indirect Dipolar Spin-Exchange Interactions between Two Rydberg Atoms,” *Phys. Rev. A* **111**(6), 062806 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevA.111.062806
- G. EMPERAUGER, M. QIAO, G. BORNET, Y. T. CHEW, R. MARTIN, B. GÉLY, L. KLEIN, D. BARREDO, T. LAHAYE and A. BROWAEYS**, “Probing Spin–Motion Coupling of Two Rydberg Atoms by a Stern–Gerlach-Like Experiment,” *Phys. Rev. A* **112**(5), 053717 (2025). DOI: 10.1103/jd4l-qy2j