2017 年度

「物質階層原理研究」第 1 回春期研究会

要旨集

2017 年 5 月 12 日（金）－ 13（土）
於　御殿場高原ホテル

理化学研究所

はじめに

「物質階層原理研究」は、理化学研究所の独創的研究提案制度の新領域開拓課題として 2017 年度からスタートした 5 年プロジェクトです。正式名称は、"Fundamental Principles Underlying the Hierarchy of Matter: A Comprehensive Experimental Study"（物質階層の原理を探求する統合的実験研究）です。

持続可能な社会の実現に向け、物質科学がエネルギー・環境・情報・医療技術等への基幹的な寄与を行うためには、その基盤をなす「物質」が如何に構築され 如何に振る舞うかを総合的に理解することが必須です。本プロジェクトは、理研が有する他に類を見ない総合性を最大限に発揮して、ハドロンから生体分子に至る物質階層の原理と機能を「物理・化学的な実験的アプローチ」を用いて探求します。具体的には、各物質階層において、その構造・機能を定める**相互作用**（主に強い相互作用と電磁相互作用）について実験研究を行い、理研の理論グループとの連携によってその基礎学理を明らかにします。さらに、物質の機能発現の要となる**励起**および**不均一性**の問題へと研究を展開していきます。前者においては、我々が未だその全容を理解していない励起現象の探索と解明に取組み、後者においては、電子デバイスや生体膜等の高度な機能を有する系における不均一な構造に基づく機能発現の原理に迫ります。

「物質階層原理研究」の大きな目標は、ボトムアップ研究に基づく理研横断的な物質科学研究ネットワークの構築です。その一環として、「レーザー」と「信号処理・データ収集」を中心とした先端的計測技術の共有・開発・展開をネットワーク化します。これらの活動を通じて、物質科学の新しい知的基盤の構築を目指します。同時に、総合研究所としての理研の環境を活かして、より広い、 より深い物質観を有する若手研究者を育成します。

「物質階層原理研究」では、年度前半に若手の発表を中心とした合宿形式の研究会を、年度後半に PI の成果報告を中心としたシンポジウムを行います。今回は、前者の第 1 回目にあたり、本プロジェクトのキックオフミーティングも兼ねています。幸いにして所内のみならず所外からも多くの方々に参加していただけました。異なる研究分野の連携は、分野の垣根のない理研の最大の特徴であり、本プロジェクトの根幹をなすものです。自由闊達な雰囲気のもとで、大いに議論し、交流を深め、新しい物質科学の芽が育つことを期待します。

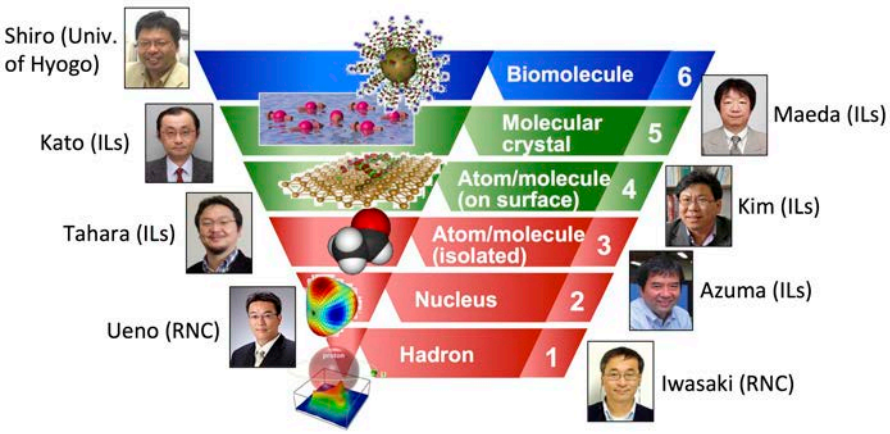
2017 年 5 月 12 日

代表 加藤 礼三

Fundamental Principles Underlying the Hierarchy of Matter: A Comprehensive Experimental Study

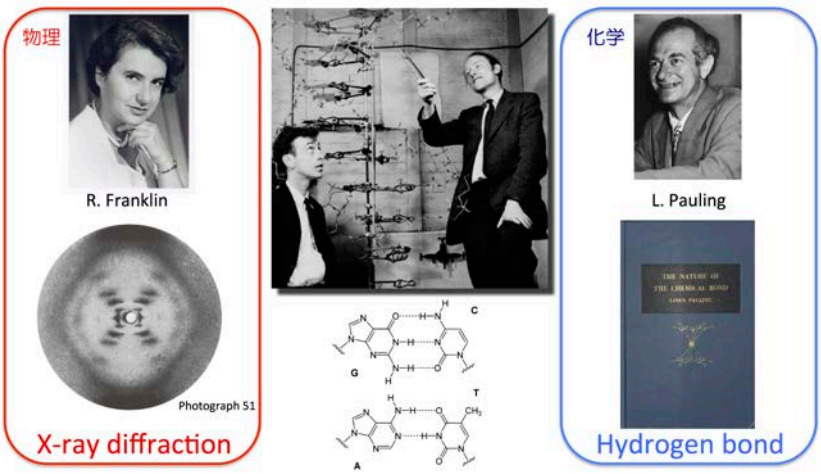
• Organization

This project is being carried out as a collaboration involving eight participating laboratories, in which we treat the hierarchy of matter from hadrons to biomolecules with three underlying and interconnected key concepts: *interaction*, *excitation*, and *heterogeneity*. The project consists of experimental research conducted using cutting-edge technologies, including lasers, signal processing and data acquisition, and particle beams at RIKEN RI Beam Factory (RIBF) and RIKEN Rutherford Appleton Laboratory (RAL).



• Physical and chemical views of matter lead to major discoveries

Although this project is based on the physics and chemistry of non-living systems, we constantly keep all types of matter, including living matter, in our mind. The importance of analyzing matter from physical and chemical points of view was demonstrated in the case of DNA. The Watson-Crick model of DNA was developed based on the X-ray diffraction, which is a physical measurement. The key feature of this model is the hydrogen bonding that occurs between DNA base pairs. Watson and Crick learned about hydrogen bonding in the renowned book “The Nature of the Chemical Bond,” written by their competitor, L. Pauling, who was a leading authority on chemical bonding. This important lesson in history teaches us that viewing matter from physical and chemical perspectives can lead to dramatic advances in science.



• Hierarchy of Matter: Universality vs. Diversity

We believe that the behavior of matter, including biological systems, can be understood through physical laws. P. Dirac, a great physicist, stated this universality as follows: “once we know the underlying physical laws, *the rest is chemistry*.” On the other hand, P. W. Anderson, another great

physicist, claimed that the interactions among multiple components in complex systems create entirely new properties in each layer of the hierarchy, with his famous phrase "*More is different*". This means that the science governing each layer is different, and it is not until we understand this diversity that we understand the universal principles completely. Therefore, we have selected "interaction" as the first key concept of this project. In addition, we selected "excitation" and "heterogeneity" as the other important key concepts to understand diversity in the hierarchy.

普遍性

P. Dirac

• *The rest is chemistry*

The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations much too complicated to be soluble.

The behavior of matter including biological systems can be understood through physical laws.

多様性

P. W. Anderson

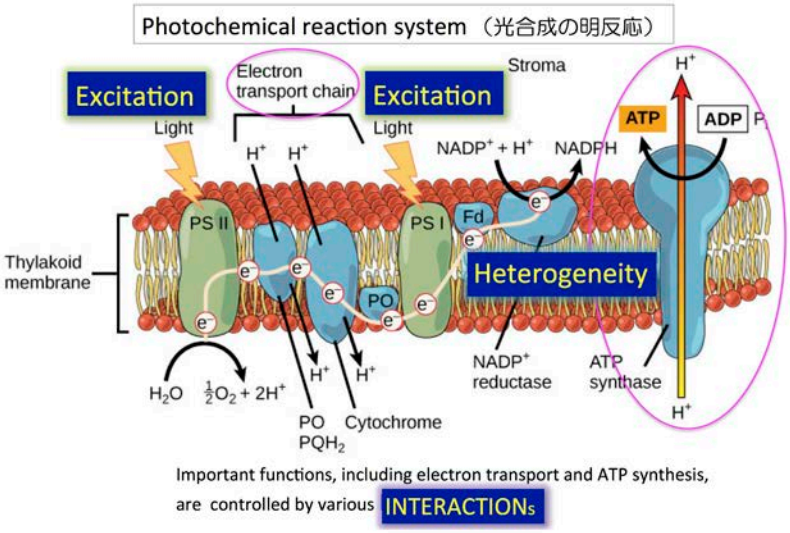
• *More is different*

The behavior of large and complex aggregates of elementary particles is not to be understood in terms of a simple extrapolation of the properties of a few particles. Instead, at each level of complexity entirely new properties appear.

The interactions among multiple components in complex systems create entirely new properties in each layer of the hierarchy.

• Three Key Concepts: Interaction, Excitation, and Heterogeneity

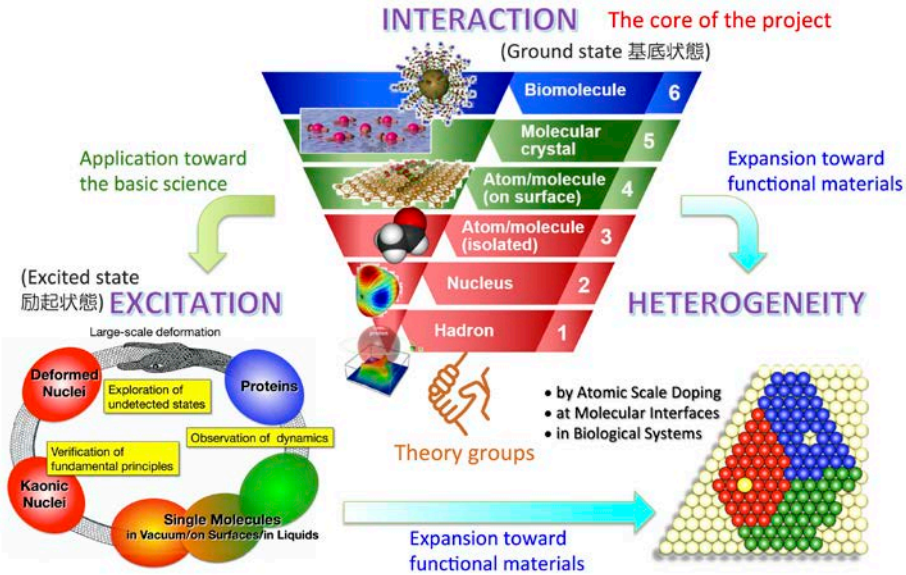
The importance of these three key concepts is well illustrated by the photochemical reaction system, involved in photosynthesis. First, the photosynthesis proceeds in the thylakoid membrane, which has a heterogeneous structure. This *heterogeneity* is essential for the emergence of the functionality of the membrane. *Excitation* by light is the most important step in photosynthesis. Finally, important processes, including electron transport and ATP synthesis, are controlled by various *interactions*.



• Three Key Concepts and Sub-projects

The three key concepts are associated with three sub-projects: "Interaction in matter" lead by Dr. Ueno, "Excitation in matter" lead by Dr. Azuma, and "Heterogeneity in matter" lead by Dr. Kim. As mentioned, the "Interaction" sub-project is the core of this project. To comprehensively understand the nature of interactions that take place in each layer, it is essential to collaborate with theory groups. The knowledge obtained by the "Interaction" sub-group will be applied toward the basic science of excitation. The "Interaction" sub-project investigates the ground state of systems, and the "Excitation" sub-project

focuses on the excited states of systems. The results obtained by these two sub-projects will be expanded towards the development of functional materials by the “Heterogeneity” sub-group. A unique point of this project is that almost all members participate in more than two sub-projects, which enhances comprehensive understanding of these concepts.



• Interaction in Matter

The “Interaction” sub-group investigates the diversity of phenomena caused by interactions that occur in each level in the hierarchy of matter. The strong interaction and the electromagnetic interaction give rise to a variety of phenomena depending on many-body effects, geometry, dimensionality, external conditions and so on. The interactions studied by each team range from the strong interaction between quarks to the van der Waals interaction between single-stranded DNA molecules, with a focus on how interactions in systems with multiple degrees of freedom lead to a diversity of phenomena. This means that many-body effects and multiple degrees of freedom are key issues in every layer of the hierarchy.

• Excitation in Matter

Excitation is a key step for the emergence of functionality, but knowledge on this topic is surprisingly limited. Thus, in this sub-group, we carry out three types of research on excitation, “Exploration of undetected excited states” in deformed nuclei, “Verification of fundamental principles through excited states” in kaonic nuclei, and “Observation of excited state dynamics” in excited molecules in liquids, on surfaces, and in vacuum. We study excitation over a wide range of energies, sizes, and time scales. At the same time, we study universality as indicated by the large-scale deformations observed in both excited-state nuclei and proteins.

• Heterogeneity in Matter

Heterogeneity is an important spatial property for the emergence of functionality as well as a challenging research target that drives the development of cutting-edge measurement technologies. This sub-group will apply the results of the “Interaction” and “Excitation” sub-groups toward the development of functional materials. In this sense, the “Heterogeneity” sub-group is closely tied to practical applications. The main topics investigated are superconducting doped diamond (as “Heterogeneity by Atomic Scale Doping”), electrical double layers in the field effect transistors (as “Heterogeneity at Molecular Interfaces”), and lipid membranes in solution (as “Heterogeneity in Biological Systems”), which are tackled through a wide range of collaborations.

• Goal of the Project

The most important goal of the project is the construction of a new cross-disciplinary research network based on the bottom-up style research activities at RIKEN, which will drive a dramatic evolution of

science and lead to unpredictable by-products. This network includes *ExpRes Dojo* where we share, learn, and report information on cutting-edge experimental technologies, primarily laser and signal processing and data acquisition technologies. This consists of school-type meetings and workshops. An important output of the *ExpRes Dojo* is the application of new technologies developed thorough the physics and chemistry research to biological systems. At the same time, we nurture young researchers with wider and deeper views of matter. We believe that the scientific community is one where innovative discoveries are frequently achieved by newcomers in different research fields. The present project will maintain the diversity of science at RIKEN and ensure an environment in which young researchers with high ambitions can easily cross over the boundaries between disciplines.

Lead researcher

Dr. Reizo Kato

プログラム

「物質階層の原理を探求する統合的実験研究」

第 1 回春期研究会　プログラム

2017 年 5 月 12 日（金）－13 日（土）

於　御殿場高原ホテル Hotel Brush Up（静岡県御殿場市神山 719）

1 日目：2017 年 5 月 12 日（金）

13:00－13:20　はじめに（加藤 礼三）

【座長：東 俊行】

13:20－13:50　O-01　宇宙における化学進化の解明のための地上実験に向けて
中野 祐司（東原子分子物理研究室／立教大学）

13:50－14:20　O-02　原子スペクトルの精密分光による超変形原子核探索
高峰 愛子（上野核分光研究室）

14:20－14:50　O-03　Study of the lightest kaonic nuclei at J-PARC
山我 拓巳（大阪大学）

14:50－15:10　休憩

【座長：岩崎 雅彦】

15:10－15:50　O-04　原子核物理学の観点からの物質階層
肥山 詠美子（肥山ストレンジネス核物理研究室）

15:50－16:30　O-05　フェルミ多粒子系ダイナミクスのシミュレーション
矢花 一浩（筑波大学計算科学研究センター）

【座長：加藤 礼三】

16:30－17:15　パネルディスカッション
「物質科学における異分野連携」

17:15－18:00　自由討論

18:00－20:00　意見交換会

20:00－22:00　ポスターセッション

2 日目：2017 年 5 月 13 日（土）

【座長：金 有洙】

9:30－10:00　O-06　電子スピン共鳴を用いた分子性物質の研究
大島 勇吾（加藤分子物性研究室）

10:00－10:30　O-07　プラズモン誘起化学反応の実空間・実時間観測
數間 惠弥子（Kim 表面界面科学研究室）

10:30－10:50　休憩

【座長：田原 太平】

10:50－11:20　O-08　界面選択的非線形分光による界面科学の深化
二本柳 聡史（田原分子分光研究室）

11:20－11:50　O-09　病原菌の細胞膜で機能するヘム輸送タンパク質の構造と機能
杉本 宏（兵庫県立大/ビームライン基盤研究部）

11:50－13:10　昼食

【座長：城 宜嗣】

13:10－13:40　O-10　Characterizing nitric oxide diffusion in a nitrite reductase: Nitric oxide reductase complex
Pohung Wang（杉田理論分子科学研究室）

13:40－14:20　O-11　量子散逸系のダイナミクス理論とその光合成初期過程への展開
石崎 章仁（分子科学研究所）

14:20－14:40　休憩

【座長：前田 瑞夫】

14:40－15:10　O-12　DNA 修飾金ナノ粒子集合体の構造変換
宝田 徹（前田バイオ工学研究室）

15:10－15:50　O-13　合成生物学:生命システムを数理モデルに基づいて設計・実装して理解する
木賀 大介（早稲田大学理工学術院 電気・情報生命工学科）

15:50　終わりに（上野 秀樹）

ポスター発表（5 月 12 日夜）

P-01　ナノ細孔を有する分子性導体の開発
井口 弘章（東北大学錯体化学研究室）

P-02　一分子蛍光計測に立脚した生体高分子の構造ダイナミクスの研究
石井 邦彦（田原分子分光研究室）

P-03　ボトムアップアプローチによる神経伝達過程の分子選択性の解明
石内 俊一（東京工業大学科　学技術創成研究院　化学生命科学研究所）

P-04　室温エネルギーミュオン源の開発とその応用
石田 勝彦（岩崎先端中間子研究室）

P-05　磁気トルクで見た三角格子有機磁性体の量子スピン液体状態
磯野 貴之（加藤分子物性研究室）

P-06　Real-space investigation of intermolecular energy transfer dynamics
今田 裕（Kim 表面界面科学研究室）

P-07　超伝導検出器を用いた原子分子ビーム計測に向けて
岡田 信二（東原子分子物理研究室）

P-08　イオン液体トランジスタによる分子性導体の超伝導相の探索
川椙 義高（加藤分子物性研究室）

P-09　Precision microwave spectroscopy of muonium atom
神田 聡太郎（岩崎先端中間子研究室）

P-10　Valence bond solid 物質 $EtMe_3P[Pd(dmit)_2]_2$ の電子スピン共鳴
金 星賢（加藤分子物性研究室）

P-11　極低温分子イオンのダイミクス解明に向けて
久間 晋（東原子分子物理研究室）

P-12　超高速時間領域ラマン分光法で観る光応答性タンパク質の反応初期過程
倉持 光（田原分子分光研究室）

P-13　超高圧下による単一成分分子性結晶[Pt(dddt)$_2$]の金属化
崔 亨波（加藤分子物性研究室）

P-14　キセノン原子 EDM 測定へ向けた能動帰還型核スピンメーザーの開発
佐藤 智哉（上野核分光研究室）

P-15　Optical isomer separation by FEL ＆ ultra low energy electron scattering from N_2O
佐山 篤（田原分子分光研究室）

P-16　光誘起界面双極子を利用した光駆動型有機超伝導トランジスタの開発
須田 理行（分子科学研究所）

P-17　Vibrational analysis of aromatic polyamide reverse osmosis membranes
Surblys Donatas（杉田理論分子科学研究室）

P-18　時間分解分光法を用いた一酸化窒素還元酵素の触媒反応機構の解明
武田 英恵（兵庫県立大理学部）

P-19　ハイブリッド汎関数法による分子性導体の磁性と電子状態
圓谷 貴夫（物質・材料研究機構）

P-20　SACLA を利用した時間分解 X 線結晶構造解析による酵素反応の観測
當舍 武彦（兵庫県立大/ビームライン基盤研究部）

P-21　核スピン偏極を用いた原子核構造研究
西畑 洸希（上野核分光研究室）

P-22　環境制御下での先端増強ラマン分光法の開発
早澤 紀彦（Kim 表面界面科学研究室）

P-23　ABC ヘム排出ポンプの構造と機能
久野 玉雄（ビームライン基盤研究部）

P-24　レーザー・マイクロ波二重共鳴法による超流動ヘリウム環境中 Au 原子の超微細構造間隔
藤田 朋美（上野核分光研究室）

P-25　DNA ナノ粒子の分散・凝集と枯渇効果
藤田 雅弘（前田バイオ工学研究室）

P-26　バンドギャップ内に存在する連続磁気励起
藤山 茂樹（加藤分子物性研究室）

P-27　Organic superconductor λ-$(BETS)_2GaCl_4$ study by Muon spin rotation
Puspita Sari Dita（岩崎先端中間子研究室）

P-28　低次元金属錯体におけるバンドフィリング制御と熱電特性の評価
村杉 英昭（東北大学錯体化学研究室）

P-29　QM/MM 法に基づく反応経路探索法の開発と酵素反応への応用
八木 清（杉田理論分子科学研究室）

P-30　一酸化窒素還元酵素の基質輸送経路に存在するアミノ酸残基の役割
山際 来佳（兵庫県立大理学部）

P-31　NOR が関わる複合体の構造安定性と機能の理論解析
山田 健太（杉田理論分子科学研究室）

P-32　Self-organization of DNA-coated gold nanoparticle assemblies through non-crosslinking aggregation
余 力（前田バイオ工学研究室）

P-33　電気化学界面の探針増強ラマン分光
横田 泰之（Kim 表面界面科学研究室）

P-34　Observation of the anomalous antiferromagnetic resonance in λ-$(BETS)_2FeCl_4$
李 泰勳（加藤分子物性研究室）

P-35　DNA 修飾金ナノ粒子集合体の配向制御
王 国慶（前田バイオ工学研究室）

口頭発表

O-01　中野 祐司

立教大学 理学部
nakano@rikkyo.ac.jp

2009 年　首都大学東京理工学研究科物理学専攻修了，博士（理学）
2009 年　日本学術振興会 特別研究員
2010 年　理化学研究所 東原子分子物理研究室 研究員
2016 年　理化学研究所 東原子分子物理研究室 専任研究員
2017 年　立教大学理学部 准教授

宇宙における化学進化の解明のための地上実験に向けて

現在まで、星間空間からは 200 種近くの分子が見つかっており、その化学組成や周囲環境に応じた多様な化学進化を遂げていることが分かっている。一方で，近年本格稼働を開始したアルマ国際望遠鏡からは新奇な観測結果が続々と発表されており, 遙か彼方で起こる原子分子反応の様子は未だはっきりと分かっていない。

そこで，星間ガスから複雑有機分子、星・惑星に至るまでの物質進化の過程を分子スケールで解明することを目指し，2010 年より理化学研究所において静電型イオン蓄積リング RICE の建設に着手した。星間空間を模擬した極低温・極高真空環境下に分子イオンビームを閉じ込めて実際に気相反応を起こさせ, 目で見てそのダイナミクスを探ろうという新しい実験的なアプローチである。

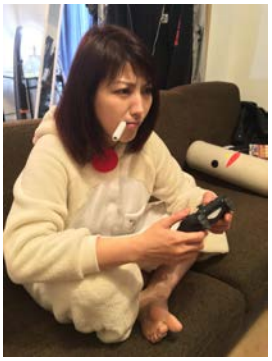
2014 年に初のビーム閉じ込めに成功し，時定数 10 min 以上での長時間蓄積が実現されている。[1] 現在、波長可変レーザーを用いて蓄積分子イオンの回転分光スペクトルの観測を行っており、その占有率分布から、分子が環境温度まで冷却される様子を観測することを目指している。振動・回転励起した分子の輻射冷却、すなわち光による内部エネルギーの放出は、星間ガスの重力収縮によるマクロな物質形成において不可欠であり、また、人類に対して天文学的な観測手段を与える重要なプロセスである。これをリアルタイムに刻々と捉える実験が進行中である。

また、星間分子の化学進化において最も重要な役割を果たすイオン-中性の衝突反応をリング内に再現するため、中性原子ビームの開発を行っている。まず負イオンビームを生成してそのプロファイルを十分に制御した後に、大強度の半導体レーザーアレイを使用して負イオンビームの電子脱離を引き起こす。これにより速度と形状のよく制御された中性ビームを作り出し、蓄積リング内のイオンビームとほぼ等速度で合流させることで相対的にゆっくりと衝突させ、低温の衝突反応ダイナミクスを追究する計画である。

参考文献

[1]　Y. Nakano *et al.*, Rev. Sci. Instr. **88**, 033110 (2017)

O-02　高峰 愛子



理化学研究所 上野核分光研究室
e-mail: icot@riken.jp

2007 年　東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻修了
2007 年　理化学研究所 山崎原子物理研究室 基礎科学特別研究員
2010 年　青山学院大学理工学部物理数理学科 前田研究室 助教
2015 年　理化学研究所 上野核分光研究室 研究員

原子スペクトルの精密分光による超変形原子核探索

原子核は数個から二百数十個の陽子と中性子が強い相互作用(核力)で結びついてできている少数多体系であり、陽子や中性子の数が数個変化するだけでその性質が大きく変わることがある。その一例として質量数(=陽子数+中性子数)が100程度の中重核領域における陽子と中性子の数がほぼ等しい原子核は、核子数の変化に伴って原子核の形が大きく変化することが予想されている[1]。しかも、中には陽子と中性子の変形効果がコヒーレントに作用することで、中重核領域ではほとんど観測例のないような超変形が^{80}Zr(陽子数=中性子数=40)等の原子核基底状態で起こりうることが示唆されている[2]。しかしこの領域の原子核は生成が困難であることを主な理由に、実験的な検証はほとんど手つかずであった。

我々はこれを実現するために、こういった希少不安定核の原子準位を精密分光することで、原子核変形を測定する。原子スペクトルには原子核スピンやそれに伴う核電磁モーメント、および原子核の大きさを反映した微細な分離や遷移周波数の同位体間でのシフトが現れる。これを利用した原子核の変形度の決定には、次の二通りの測定が挙げられる。

- 超微細構造*B*定数から導く核電気四重極モーメント: 核電荷の空間的変形度を表すため、原子核変形の度合を直接高感度にプローブすることができる。（ただし核スピン1以上の核のみに適用可。）
- 同位体シフトから導く核荷電半径: 原子核が変形していると核荷電半径は原子核が球形と仮定したときよりも大きくなるため、そこから変形度の絶対値を決定することができる。(任意の核スピンの核に対して適用可。)

これらの測定を実現するために、理研RIビームファクトリーで得られる高エネルギー不安定核ビームを原子精密分光可能なエネルギーまで減速冷却するSLOWRI装置[3]を開発すると共に、この「物質階層原理」プロジェクトではSLOWRI装置から得られる低エネルギー不安定核ビーム(eV-50 keV)を使った高精度レーザー分光装置および原子ビーム共鳴装置を開発し、従来には存在しなかった『高エネルギーで生成される希少不安定核に対する原子精密分光』を可能とする手法を確立させる。

参考文献

[1] P. Möller et al., *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **109-110**, 1 (2016).
[2] S. J. Zheng et al., *Phys. Rev. C* **90**, 064309 (2014); I. Dudek et al., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 252502 (2002)等.
[3] M. Wada, *Nucl. Instr. Meth. B* **317**, 450 (2013).

O-03　山我 拓巳

大阪大学大学院
e-mail: yamaga@rcnp.osaka-u.ac.jp

2014 年 大阪大学大学院　博士後期課程

Study of the lightest kaonic nuclei at J-PARC

反K中間子と核子の間の相互作用（KbarN 相互作用）は、低エネルギーにおける、Kbar-N 散乱実験[1]や、K 原子からの X 線測定[2]により、アイソスピン I=0 のチャンネルで強い引力であることが明らかとなっている。この引力的な KbarN 相互作用の帰結として、反 K 中間子と原子核の束縛状態である反 K 中間子束縛原子核(kaonic nuclei)の存在が理論的に示唆されている[3]。この反 K 中間子束縛原子核の束縛エネルギーと崩壊幅を調べることは、これまでの散乱実験などでは測定することができない KbarN 閾値以下での KbarN 相互作用の情報を引き出すことにつながるため、実験・理論の両方面において多くの研究が行われてきている。その中でも、最も単純な系である Kpp 束縛状態に関する研究は、反 K 中間子束縛原子核を系統的に調べていく上で非常に重要な出発点である。

理論計算によると、Kpp 束縛状態の束縛エネルギーは数 10 MeV 程度になることが予想されている。これは、通常の原子核の束縛エネルギー（核子当り 8 MeV 程度）に比べて大きい。理論計算には、計算に用いる KbarN 相互作用の違いにより、その束縛エネルギーの大きな違いが見られており、実験的にその束縛エネルギーを測定することが望まれている。

実験による Kpp 束縛状態の探索では、束縛エネルギーが約 100 MeV と報告されており、理論的な予測に比べ明らかに大きな値となっている。また、いくつかの実験では Kpp 束縛状態の生成が見られないとする結果も報告されており、Kpp 束縛状態の議論にはいぜんとして結論が待たれている状況である。Kpp 束縛状態の生成には反応過程が大きく影響を及ぼすことが考えられており、このような状況を解決するためには、これまで行われた実験と異なる反応を用いた実験がなされる必要がある。

そこで我々は、J-PARC が誇る大強度 K 中間子ビームを用いた Kpp 束縛状態の探索実験を行った（J-PARC E15 実験[4]）。最新の解析によると、Kpp 束縛状態と考えられるピークが見出されており、その束縛エネルギーと幅は理論計算とほぼ一致したものであった。本公演では、この結果について詳しく紹介する。

参考文献

[1] D. Martin, Nucl. Phys. B, B179, p.33 (1981).
[2] G. Bazzi, et. Al., Phys. Lett. B, 704, p.113 (2011).
[3] Y. Akaishi and T. Yamazaki, Phys. Rev. C, 6, p. 044005 (2002).
[4] M. Iwasaki, et. Al., J-PARC E15 proposal.

O-04　肥山 詠美子

理化学研究所仁科加速器研究センター
e-mail:hiyama@riken.jp

1998 年　九州大学大学院理学研究科物理学専攻博士（理学）取得
1998～2000 年　理化学研究所ミュオン科学研究室基礎特別研究員
2000～2004 年　高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所助手
2004 年～2008 年　奈良女子大学理学部物理科学科　准教授
2008 年～20017 年　理化学研究所仁科加速器研究センター　准主任研究員
2017 年～　同研究所同研究センター　主任研究員、現在に至る

原子核物理学の観点からの物質階層

物理学の興味ある課題の中には、少数粒子系（３体以上）のシュレディンガー方程式を「精密」に解くことに帰着する課題が多い。「精密」に解くことによって、新しい知見を得たり、新しい予言や発見に至ることがしばしばある。また、同時に、シュレディンガー方程式を解くために必要なハミルトニアンの決定、すなわち、粒子間の相互作用が重要になる。物理学では、少数多体系のシュレディンガー方程式を精密に、容易に解ける、適用範囲が広い方法を構築すること、さらには粒子間相互作用を決定することが大きな目的の一つである。この中で、「無限小変位ガウス・ローブ法」という新しい計算法を独自に提唱・確立した。この方法は、精密でかつ適用範囲が非常にひろい。そこで、原子核物理学を中心に、ミュオン触媒核融合、冷却原子などの多方面の研究に適用してきた。中でも、ハイパー核という新しい原子核（陽子・中性子とハイペロン---ストレンジネス クォークを含む粒子---から成る多体系）への適用し、不定性の大きなハイペロン一核子間相互作用の決定に貢献をした。本会議では、計算法をその適用例として、ハイペロン一核子間の相互作用をどのように決定していくのかについて講演する。

O-05　矢花 一浩

筑波大学計算科学研究センター
e-mail: yabana@nucl.ph.tsukuba.ac.jp

1987 年　京都大学大学院理学研究科物理学第二専攻修了
1988 年　新潟大学理学部　助手
1994 年　新潟大学理学部助　教授
1999 年　筑波大学物理学系　助教授
2002 年　筑波大学大学院数理物質科学研究科　教授
2004 年　筑波大学計算科学研究センター　教授

フェルミ多粒子系ダイナミクスのシミュレーション

量子力学に支配される物質の構造やダイナミクスに対して、密度汎関数理論に基づく非経験的な記述が様々な分野で発展している。本発表では、発表者が長年にわたり携わってきた、時間依存密度汎関数理論に基づくフェルミオン多粒子系の量子ダイナミクスに対する記述の発展を、原子核（核子多体系）と物質科学（電子多体系）を対比しつつ紹介したい。

３次元的な多フェルミオン系のダイナミクスに対するシミュレーションは、原子核物理の分野で 1970 年代の後半に始まった。線形応答理論と組み合わせた巨大共鳴状態の解明や、初期値問題としての重イオン衝突現象への応用が行われ、今日でも原子核ダイナミクスを微視的に調べる方法として中心的な役割を果たしている[1]。

1980 年代に入るとナノ科学の分野が創出され、有限量子多体系として類似する原子核物理の様々な手法が応用された。その中で私は、原子核物理分野で発展していた量子シミュレーションの方法を物質科学の第一原理計算の方法と結びつけることにより、電子ダイナミクスに対する第一原理シミュレーションの方法を発展させた。線形応答理論と組み合わせたこの方法は、時間依存密度汎関数理論を用いた電子励起や光応答計算の手法の一つとして、今日様々な物質科学ソフトウェアに実装されている。

原子核物理学において時間依存密度汎関数理論は、線形応答による光応答に加え、基底状態から大きく離れた大振幅な量子ダイナミクスである原子核衝突に応用されている。物質科学の分野でこの大振幅な量子ダイナミクスに対比されるものとして、高強度パルスレーザーと物質の相互作用の解明がある。固体に高強度なパルスレーザーを照射すると、著しく非線形な電子励起が引き起こされる。物質を破壊する強度ではこの反応は非熱的なレーザー加工技術に関係し、それよりも弱い強度では新奇な光デバイスのメカニズムをもたらすことが期待され、盛んに実験が行われている。このような高強度パルス光を用いた科学分野において時間依存密度汎関数理論によるシミュレーション法は、大規模計算により実験を精緻に記述する数値実験室として発展を遂げている[2,3]。

参考文献

[1] T. Nakatsukasa et.al, Rev. Mod. Phys. 88, 045004 (2016).
[2] M. Lucchini et.al, Science 353, 916 (2016).
[3] A. Sommer et.al, Nature 534, 86 (2016).

O-06　大島 勇吾

理化学研究所 加藤分子物性研究室
e-mail: yugo@riken.jp

2003 年　神戸大学大学院　自然科学研究科構造科学専攻　修了
2003 年　National High Magnetic Field Laboratory ポスドク研究員
2004 年　東北大学金属材料研究所　磁気物理学部門　助手
2007 年　東北大学金属材料研究所　磁気物理学部門　助教
2009 年　理化学研究所　加藤分子物性研究室　研究員
2012 年　理化学研究所　加藤分子物性研究室　専任研究員

電子スピン共鳴を用いた分子性物質の研究

負電荷とスピン 1/2 をもつ電子は固体物性における中心的存在であり、物質中の電子の環境の違いが多彩な物性を導く。電子スピン共鳴(Electron Spin Resonance, ESR)はその電子（正確に言えば不対電子）を検出する分光法の一種である。ESR は不対電子をプローブするには検出感度も高く非常に有効な手法であるが、研究対象物質に不対電子が存在することが必要なため、核磁気共鳴(NMR)と比較してその適用範囲は狭い。しかしながら、遷移金属イオンを含む無機化合物やフリーラジカルを持つ有機化合物などの研究に古くから用いられてきている[1-3]。

我々はこれまでに遷移金属を含む分子磁性クラスターやπ電子からなる分子性物質に ESR を適用し、そのミクロな電子状態を明らかにする研究を展開してきた。例えば、分子磁性クラスターではエネルギー準位が離散的になるため、ESR の共鳴磁場から交換相互作用 J や一軸異方性 D 項などのミクロなパラメーターが得られる。一方で、S=1/2 の三角格子からなる分子性導体 β'-X[Pd(dmit)$_2$]$_2$（X は 1 価カチオン）では、g 値の角度依存性から ESR がどこのスピンをプローブしていて、どのようなスピン相関を持っているかを明らかにし、さらに、線幅の角度依存性から系がどのようなスピンダイナミクスを持っているかを明らかにしている。

このように ESR は研究対象物質のミクロな電子状態を調べる最も直接的なプローブ法の 1 つであるため、そこから得られる情報は多い。特に、我々はミリ波やサブミリ波を利用した多周波 ESR 装置を独自に開発し、特色のある ESR 研究を展開しているのでそれらの結果も併せて紹介したい。講演では、ESR がどういう測定で、何がわかるのかを分子性物質への適用例を中心に説明していく。

参考文献

[1] A. Abragam and B. Bleany “Electron paramagnetic resonance of transition ions” Oxford University Press. 1970
[2] 伊達宗行　著　「電子スピン共鳴」　培風館
[3] 山内淳　著　「磁気共鳴-ESR 電子スピンの分光学」　サイエンス社

O-07　數間 惠弥子

理化学研究所　Kim 表面界面科学研究室
e-mail: emiko.kazuma@riken.jp

2012 年　東京大学大学院　工学系研究科応用化学専攻 博士取得
2012 年～2013 年　東京大学生産技術研究所　特任研究員
2013 年～2015 年　日本学術振興会　特別研究員 SPD
2015 年～　理化学研究所　基礎科学特別研究員

プラズモン誘起化学反応の実空間・実時間観測

金属ナノ構造が示す局在表面プラズモン共鳴は、金属表面近傍のナノ領域に光を効率よく集め、強い光電場を生じることから、近接場分光法ならびに物質の光応答や反応を増強する手段として幅広い応用が期待されている。中でも、金属ナノ構造表面に吸着した分子は光によって励起されたプラズモンによって結合生成および解離反応(プラズモン誘起化学反応)が起こることが近年報告され、新奇の光触媒反応として注目を集めている。これらの反応はプラズモンの減衰過程で生じるホットエレクトロンが分子へ移動することで起こると考えられてきた[1,2]。一方、昨年には表面増強ラマン散乱による解析から、プラズモンによる分子の直接励起という、異なる機構が示唆された[3,4]。これらの機構はプラズモンの電場が局在するナノ領域における局所の化学反応の平均的な観測に基づき議論されているが、未解明な点が多くある。さらに、プラズモンの電場は金属表面から指数関数的に減衰するため、より深い知見を得るためには、単一分子レベルでのプラズモン誘起化学反応を実空間および実時間観測することが必須である。

本研究では、走査型トンネル顕微鏡(STM)を用いて単一分子レベルのプラズモン誘起化学反応を実空間・実時間観測することにより反応機構を明らかにした。プラズモンは銀製の STM 探針と金属基板の間のナノギャップに光を照射することで励起できる。対象とする分子として銀及び銅基板上で光解離が観測されたジメチルジスルフィド(DMDS)[5]を用いた。実空間観測により、プラズモンの電場が強い場所で DMDS 分子の解離反応が優先的に起こることが示された。さらに、反応効率の入射光エネルギー依存性と反応の実時間観測により、プラズモン誘起化学反応が金属から分子へのホットエレクトロンの移動によるものではなく、プラズモンによる吸着分子の非占有状態への直接励起に基づくものであることが明らかとなった。

参考文献

[1] M. L. Brongersma, N. J. Halas, P. Nordlander, P. *Nat. Nanotech.* **10**, 25−33 (2015).
[2] S. Mukherjee *et al. J. Am. Chem. Soc.* **136**, 64−67 (2014).
[3] C. Boerigter, U. Aslam, S. Linic, *ACS Nano* **10**, 6108−6115 (2016).
[4] C. Boerigter, R. Campana, M. Morabito, S. Linic, *Nat. Commun.* **7**, 10545 (2016).
[5] E. Kazuma *et al. J. Am. Chem. Soc.* **139**, 3115–3121 (2017).

O-08　二本柳 聡史

理化学研究所 田原分子分光研究室
e-mail: nsatoshi@riken.jp

2004 年　北海道大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了
2004 年　テンプル大学化学部 博士研究員
2007 年　理化学研究所 田原分子分光研究室 基礎科学特別研究員など
2014 年　理化学研究所 田原分子分光研究室 研究員
2016 年　理化学研究所 田原分子分光研究室 専任研究員

界面選択的非線形分光による界面科学の深化

我々の身の周りにある機能性物質について考えるとそのほとんど全てが（学問領域にかかわらず）界面を有していることがわかる。例えば、物理において、半導体が半導体デバイスになるためには他の物質と接触することが本質的である。（cf.「Interface is the device.」Nobel Lecture 2000, H. Kroemer）また、化学における不均一化学反応（固体触媒等を用いる化学反応）は界面でしか進行しない。さらに、生体は脂質膜界面を積層したものである。このように考えていくと、物質の界面を理解することは物質科学において極めて本質的な課題であることがわかる。一方で、昔パウリが「God made the bulk; surfaces were invented by the devil.」と言ったほど表面界面を制御・理解することは難しい。その理解の上での困難さの本質は、バルク物質が存在する中で界面だけを選択的に観測することにある。

偶数次非線形光学現象には界面だけから発生するという原理的な特徴がある。我々はこの原理を利用して、これまでに様々な新規界面選択的非線形分光法を開発してきた［1,2］。また、これらの新規分光法を用いて最も基本的な液体界面である空気/液体界面の分子構造と分子振動ダイナミクスについて研究してきた。これらの研究を通して空気/液体界面に関しては、今やバルクと同等の分光情報が界面においても取得可能となっている。さらにごく最近になって我々の界面選択的非線形分光法が固液界面にも適用可能であること[3]、並びに、界面における光化学反応の追跡が可能であること[4]を示した。これらの新しい展開により、我々の分光法を用いて、様々な機能性物質の界面構造を調べることが可能になりつつある。そのような研究を進めることで、マクロな界面の機能とミクロな界面構造の関係について本質的な知見が得られるものと期待している。

参考文献

[1] S. Nihonyanagi, J. A. Mondal, S. Yamaguchi, and T. Tahara, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, 2013, 64, 579. [2] S. Nihonyanagi, S. Yamaguchi, and T. Tahara, *Chem. Rev.*, 2017, DOI: 10.1021/acs.chemrev.6b00728. [3] A. Myalitsin, S. Urashima, S. Nihonyanagi, S. Yamaguchi, and T. Tahara, *J. Phys. Chem. C* 2016, 120, 935. [4] K. Matsuzaki, R. Kusaka, S. Nihonyanagi, S. Yamaguchi, T. Nagata, and T. Tahara, *J. Am. Chem. Soc*. 2016, 138, 7551.

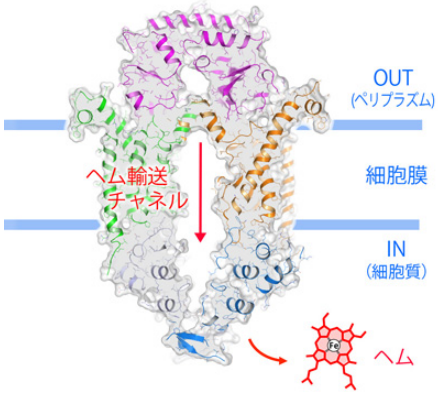
O-09　杉本 宏

理化学研究所 ビームライン基盤研究部
e-mail: sugimoto@spring8.or.jp

2000 年　北海道大学大学院理学研究科博士課程修了
2000 年　米国コロムビア大学 博士研究員
2001 年　理化学研究所 城生体金属科学研究室 研究員
2009 年　理化学研究所 城生体金属科学研究室 専任研究員
2017 年　理化学研究所 ビームライン基盤研究部 専任研究員

病原菌の細胞膜で機能するヘム輸送タンパク質の構造と機能

細胞の内側と外側は、脂質でできた膜によって隔てられているが、その細胞膜の中には多くのタンパク質が存在している。例えば、輸送タンパク質（トランスポーター）や透過タンパク質は栄養素やイオンなどの低分子を細胞内へと取り込んだり、受容体タンパク質は細胞外からのシグナルを受け取って細胞内へと伝達する。このような細胞膜を介したモノのやり取りは、生体にとって重要な役割を担っている生理活性物質や薬剤の吸収などとも密接に関わっていることから注目されている。病原菌では、ヒトの血液からヘム分子を鉄源として獲得するため、菌の細胞内へ取り込む際に「ヘムトランスポーター」が細胞膜で機能しており、我々はこの分子メカニズムに注目してきた。細胞膜の中でヘムトランスポーターがヘムを輸送するときには、まずヘムをどのように捕まえて、どのような仕組みで別のタンパク質へ受け渡して輸送するのか。そして、細胞内へ輸送する際に必須な生体エネルギー物質であるATPの役割は興味深い。我々が行ったX線結晶解析および生化学的な解析からは、ヘムトランスポーターが輸送する際には非常に大きな構造変化を伴う事が示唆され、さらに効率的にヘムを輸送するための輸送経路の特徴が見出された。これまでに明らかになった構造的なメカニズムとともに、今後明らかにしたい動的なメカニズムの解析について展望する。



参考文献
[1] Naoe, Y., Nakamura, N., Doi, A., Sawabe, M., Nakamura, H., Shiro, Y., and Sugimoto, H. “Crystal structure of bacterial haem importer complex in the inward-facing conformation.” *Nat. Commun.* **7**, 13411 (2016).

O-10 Po-hung Wang

RIKEN Theoretical Molecular Science Laboratory
e-mail: po-hung.wang@riken.jp

2013 Ph.D. (Physics), University College London, UK
2013 Postdoctoral researcher, RIKEN Theoretical Molecular Science Laboratory

Characterizing nitric oxide diffusion in a nitrite reductase:nitric oxide reductase complex

Nitrite reductase (NiR) and Nitric oxide reductase (NOR) are two important enzymes in the microbial denitrification. This process sequentially reduces nitrogen-containing compounds: $NO_3^- \rightarrow NO_2^- \rightarrow NO \rightarrow N_2O \rightarrow N_2$[1]. In this process, NiR produces nitric oxide (NO) from nitrite while NOR catalyzes the reaction using NO as a substrate. While NO is regarded as an important integral signaling molecule in eukaryotes and bacteria[2,3], it is also highly cytotoxic and reactive. How NO molecules can diffuse from periplasmic NiR into water and membrane, and from membrane to membrane-bound NOR remains a question. This is intriguing that almost no NO is detected in the membrane, suggesting an effective NO decomposition system in denitrification[4]. In this study, we characterize NO diffusion in this complex system using molecular dynamics (MD) simulations. We carried out multiple 100-ns independent simulations with a system consisting of NiR, NOR, NO, membrane, water, and counterions. We have found that the NO molecules released from the active site of NiR are able to diffuse out of NiR and enter into the membrane via water. Some NO molecules even reached the active site of NOR within 100 ns simulation timescale. Such rapid NO migration inside and between proteins provides a novel insight into how NiR and NOR functionally regulate and direct NO into the designated region inside protein.

[1]W.G. Zumft, *Microbiol. Mol. Biol. Rev.* **61**, 533 (1997).
[2]D.S. Bredt, S.H. Snyder, *Neuron* **8**, 3 (1992).
[3]L.-M. Nisbett, E.M. Boon, *Biochemistry* **55**, 4873 (2016).
[4]C. Braun, W.G. Zumft, *J. Biol. Chem.* **266**, 22785 (1991).

O-11　石崎 章仁

自然科学研究機構分子科学研究所
ishizaki@ims.ac.jp

2008 年　京都大学大学院理学研究科化学専攻修了
2008 年　カリフォルニア大学バークレー校　学振海外特別研究員
2010 年　ローレンス・バークレー国立研究所　博士研究員
2012 年　自然科学研究機構分子科学研究所　特任准教授
2016 年　自然科学研究機構分子科学研究所　教授

量子散逸系のダイナミクス理論とその光合成初期過程への展開

凝縮相分子系に限らず如何なる量子系も純粋な孤立系とは見なし得ず、常に何らかの外界と接触することで、ときに量子性が破壊され、ときには量子性が頑健に保持される。殊に凝縮相分子系においては量子性の維持と崩壊のバランスが化学ダイナミクスの様態に大きな影響を及ぼし得るため、「多自由度ゆえに生じる動的揺らぎや散逸に曝されながら量子効果はどのような影響を受けるのか」を理解することは量子散逸系研究および分子科学の重要な課題である。

光合成初期過程における電子エネルギー移動や電荷分離過程は、そのような量子ダイナミクス現象の一例である。光合成色素タンパク質複合体では、捕捉された太陽光が色素分子の電子励起エネルギーとなり、ほぼ 100%の収率で反応中心へ輸送され電気化学エネルギーに変換される。しかし、その驚異的なエネルギー輸送効率および変換効率の物理学的理由は未だ不明である。これまで、エネルギー移動を記述する標準的な理論として「電子励起系とタンパク質環境との相互作用を摂動として扱う Redfield 理論」と「電子励起間の静電相互作用を摂動として扱う Förster 理論」が用いられてきたが、天然の光合成におけるエネルギー移動は両理論の妥当性が明らかで無い中間領域で実現しており、その動態の記述と理解は光合成研究において大きな問題として残されていた。

本講演では、タンパク質環境が誘起する色素電子状態の「動的揺らぎの時間スケール」に着目し、色素電子状態の揺らぎとタンパク質の局所的な応答の間に成り立つ揺動散逸関係を正しく取り扱うことで導出される量子ダイナミクス理論を議論する。さらに、従来の Redfield 理論および Förster 理論では記述不可能なパラメータ領域で起こるエネルギー移動の動態、特に天然の状況に対応するパラメータ領域でこそエネルギー移動の速度が最適化されていることを明らかにする。また、動的揺らぎに曝された量子的重ね合わせ状態の頑健性・脆弱性およびエネルギー移動に要する活性化自由エネルギーを解析することで、高速エネルギー移動およびレーザー分光実験で見出された長寿命量子ビートの物理的起源を議論したい。

参考文献

[1]　G. D. Scholes et al., “Enhancing function in chemical and biophysical systems using coherence,” *Nature* **543**, 647 – 656 (2017).

O-12　宝田 徹

理化学研究所　前田バイオ工学研究室
e-mail: ttkrd@riken.jp

1999 年　東京大学大学院工学系研究科化学生命工学専攻修了
2000 年　東京大学先端科学技術研究センター 協力研究員
2001 年　九州大学大学院工学研究院 助手
2003 年　理化学研究所 前田バイオ工学研究室 研究員
2007 年　同 専任研究員

DNA 修飾金ナノ粒子集合体の構造変換

金属ナノ粒子の集合体は、孤立粒子やバルク材料とは異なる光学特性や電磁気特性を示すため、機能材料への応用が期待されている。簡便かつ精密にナノ粒子集合体をつくるには、DNA の二重鎖形成の利用が有効である。本研究では、当研究室で見出された DNA 修飾ナノ粒子のコロイド化学的性質を利用して、ナノ粒子集積体の構造を変換することを試みている。

そのコロイド特性を図 1 にまとめる。一本鎖 DNA で覆われたナノ粒子は、DNA が粒子間に静電反発と立体反発をもたらすため、高塩濃度下でも安定に分散する。ところが、相補鎖を加えて粒子表面の DNA を二重鎖にすると、粒子は直ちに自発的に凝集する（非架橋凝集）。この非架橋凝集は DNA の末端構造に強く依存する点に特徴があり、DNA 層の最表面に一塩基ミスマッチ[1]または一塩基突出[2]があると、粒子は極めて安定に分散する。末端塩基対間に生じる疎水性相互作用と van der Waals 相互作用（スタッキング相互作用）による引力と、末端ミスマッチ塩基のミクロブラウン運動に由来する斥力によってコロイド安定性が決まると考えられる。架橋凝集と非架橋凝集を比べると、凝集体が熱力学的に安定なのは架橋型であり、凝集の迅速性と可逆性は非架橋型の方が優れている[3]。そこで我々は、架橋反応でナノ粒子集合体の基本骨格を組み立て、非架橋反応でその構造を変換する戦略を立てた。これまでに、DNA 修飾金ナノ粒子 3 量体の非架橋凝集による収縮が、透過型電子顕微鏡（TEM）で観察されている[4]。本発表では、この系を拡張して数百個の粒子からなる線形集合体（図 2）に非架橋凝集を誘起した結果について議論したい。

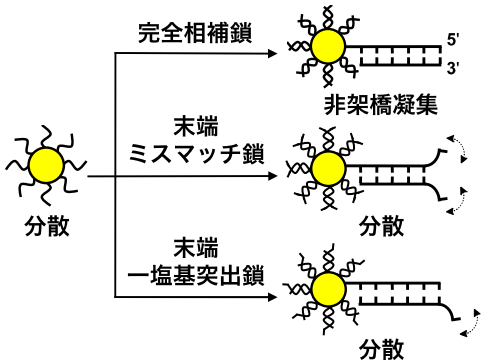


図 1　DNA 修飾ナノ粒子のコロイド安定性

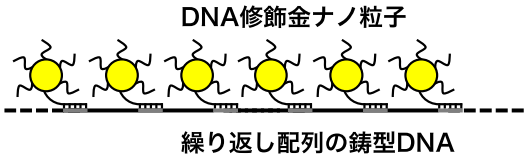


図 2　DNA 修飾ナノ粒子集合体の模式図

[1] K. Sato, K. Hosokawa, M. Maeda, *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 8102. [2] Y. Akiyama, H. Shikagawa, N. Kanayama, T. Takarada, M. Maeda, *Chem. Eur. J.* **2014**, *20*, 17420. [3] G. Wang, Y. Akiyama, S. Shiraishi, N. Kanayama, T. Takarada, M. Maeda, *Bioconjugate Chem.* **2017**, *28*, 270. [4] Y. Akiyama, H. Shikagawa, N. Kanayama, T. Takarada, M. Maeda, *Small* **2015**, *11*, 3153.

O-13　木賀 大介

早稲田大学 理工学術院 電気・情報生命工学科
e-mail: kiga@waseda.jp

1999 年　東京大学大学院理学系研究科生物化学専攻単位取得退学
1999 年　博士（理学）東京大学
1999 年　科学技術振興事業団　横山情報分子プロジェクト　研究員
2001 年　理化学研究所　ゲノム科学総合研究センター　リサーチアソシエート
2003 年　東京大学　先端科学技術研究センター 科学技術振興特任研究員
2004 年　東京大学　大学院総合文化研究科　助手
2005 年　東京工業大学　大学院総合理工学研究科　知能システム科学専攻　助教授・准教授
2016 年　早稲田大学 理工学術院 電気・情報生命工学科　教授

合成生物学:
生命システムを数理モデルに基づいて設計・実装して理解する

本発表では、合成生物学の定義を、多階層からなる生命システムのある階層に注目し、その階層の要素を「部品」として組み合わせて、上位階層のシステムを構築することを研究手段とする生物工学・生物学、とする。元来、合成生物学の主眼は、大量に蓄積された生命情報を活かした数理モデルに基づいた組み合わせの構築にあった。しかし、職人芸に頼った構築になってしまうことが実際のところ多いことが、合成生物学の現状である。本発表では、改めて、合成生物学における数理モデルを組み合わせた設計について、工学的だけでなく理学的な意味を再確認する。そして、この意味から未開拓であるとみなせる生物学の伸びしろを最大限活かす研究手法として、合成生物学の本質である「設計生物学」に焦点を当てた紹介を行う。

遺伝子を組み合わせた人工遺伝子回路について、その挙動が生化学に基づく数式によって説明できると共に、遺伝子回路を組み合わせてより大規模なネットワークを構築するした際の挙動も予測できるようになっている。分子生物学の黎明期に物理学者が生物学に参入して扱った研究対象が、細胞の DNA 複製と発現調節の本質を持ちつつ要素数の少ないウィルスであったと同様に、合成生物学の最初のターゲットも、細胞とウィルスに共通して重要な運命決定機構について、機構内の相互作用をより単純化した genetic toggle switch となった[1]。この研究が高く評価される点が、人工遺伝子回路を構成する遺伝子の On-Off に関するパラメタ変化による細胞の挙動の変化を、数理モデルによってクリアに説明したことにある。本発表では、我々による組み合わせの例として、toggle switch と遺伝子大量発現を組み合わせて細胞を初期化した後に多様化させた例、細胞間通信に依存した遺伝子発現の活性化と toggle switch とを組み合わせることによって細胞を多様化させた例、の２つを紹介する[2-3]。

また、現在の地球生命の普遍性から外れた「ありえた生命」を、生体高分子の組み合わせによって構築する意義についても紹介したい。

[1]　T. S. Gardner et al., Nature 403, 339 (2000).
[2]　K. Ishimatsu et al., Acs Synth Biol 3, 638 (2014).
[3]　R. Sekine et al., Proc Natl Acad Sci U S A 108, 17969 (2011).

ポスター発表

P-01　井口 弘章

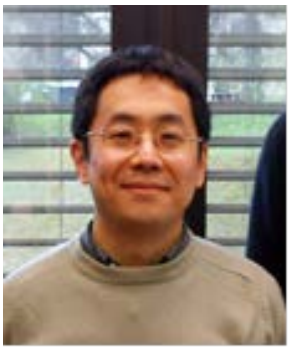
東北大学大学院理学研究科化学専攻　錯体化学研究室
e-mail: h-iguchi@m.tohoku.ac.jp

2011 年　東北大学大学院理学研究科化学専攻　博士課程修了
2011 年　日本学術振興会特別研究員(SPD)
　　（受入先：九州大学大学院工学研究院 君塚信夫研究室）
2013 年　東北大学大学院理学研究科化学専攻　助教

ナノ細孔を有する分子性導体の開発

一次元電子系物質における電子状態・物性の制御は主に光・圧力・熱といった外場を用いて行われてきた。もし結晶中にナノ細孔を導入できれば、細孔への分子の吸脱着によって電子物性制御を行うことができると考えられる。そこで我々は、堅牢な骨格と分子サイズの規則的な細孔を有する多孔性配位高分子 (MOF) と分子性導体の両者の特長を有する新しい物質群の開発を行った。すなわち、金属イオンに結合する配位子として、大きなπ共役平面を有するナフタレンジイミド誘導体 (NDI-py) を合成し、酸化還元を行いながら骨格を構築することで、ナノ細孔を有する分子性導体 (ポーラス分子性導体: PMC) の合成を行った。現状ではまだ空気酸化や溶媒脱離による結晶性の劣化が見られるが、比較的安定なものでは、室温で 10^{-2} S cm^{-1} 程度の電気伝導性を示す針状結晶が得られている。

P-02　石井 邦彦



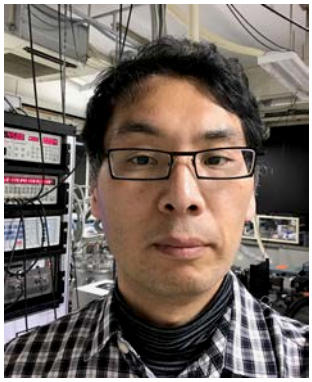
理化学研究所　田原分子分光研究室
e-mail: kishii@riken.jp

2003 年　東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了
2003 年　理化学研究所田原分子分光研究室協力研究員
2006 年　理化学研究所田原分子分光研究室研究員
2014 年　理化学研究所田原分子分光研究室専任研究員

一分子蛍光計測に立脚した生体高分子の構造ダイナミクスの研究

我々は共焦点顕微鏡を用いた一分子蛍光計測を基盤として、溶液中の生体高分子の自発的な構造揺らぎとその機能・構造形成機構との関連を研究している。タンパク質などの生体高分子は、室温水溶液中で水素結合・静電相互作用・疎水性相互作用等の様々な相互作用の複雑な絡み合いの結果として、特有の天然構造と機能を発現している。その機構解明のため、高い時間分解能と構造分解能をもつ先端的な一分子計測技術を開発し、生体高分子の構造不均一性と自発ダイナミクスの解明に取り組んでいる。これまでに我々は、パルスレーザーを用いた蛍光寿命測定を取り入れた二次元蛍光寿命相関分光法（2D-FLCS）を開発し、タンパク質の折り畳みや DNA/RNA の構造変化を調べてきた。本合宿では、これまでの 2D-FLCS を用いた研究成果を紹介する。

P-03　石内 俊一



東京工業大学化学生命科学研究所
e-mail: ishiuchi.s.aa@m.titech.ac.jp

2001 年　総合研究大学院大学（分子科学研究所）修了 博士（理学）
2001 年　慶応義塾大学理工学部　特任助手
2003 年　JST　さきがけ研究員
2005 年　東京工業大学資源化学研究所　助教
2017 年　東京工業大学化学生命科学研究所　准教授

ボトムアップアプローチによる神経伝達過程の分子選択性の解明

神経伝達過程ではシナプス前細胞から放出された神経伝達物質がシナプス後細胞にある特定のレセプターに結合することでシグナルが伝達する。この過程は分子選択的であり、そのメカニズムを解明するには、レセプターに本来結合しないものも含む様々なリガンドとの錯合体の構造を研究する必要がある。我々は、β_2-アドレナリンレセプターの結合部位を切り出したペプチド SIVSF と種々のリガンド分子との錯合体の構造を気相分光の手法を用いて研究するボトムアップアプローチを進めている。アドレナリンには２級アミノ基とカテコール基の２つの水素結合サイトがあるが、後者が SIVSF と結合することが分かった。一方、１級アミノ基をもつノルアドレナリンはβ_2-アドレナリンレセプターに結合しないが、一般にその様なリガンド分子はアミノ基が SIVSF と水素結合を形成することが分かった。

P-04　石田 勝彦

理化学研究所　岩崎先端中間子研究室
e-mail: ishida@riken.jp

1985 年 理研金属物理研究室　研究員補
2000 年 理研ミュオン科学研究室副主任研究員
現在　理研仁科センター岩崎先端中間子研究室　副主任研研究員

室温エネルギーミュオン源の開発とその応用

加速器施設で通常得られるミュオンビームはその発生由来上 MeV 以上のエネルギーと幅を持つためにビームとしては扱いにくい面がある。室温エネルギーのミュオン（~0.3　eV）が得られれば、それを加速することにより、格段に性質の良いビームが得られる。室温ミュオンを効率よく作るために、MeV ミュオンの物質注入、拡散による物質表面への移動と真空中へのミュオニウム放出、レーザーによるイオン化、ミュオン加速、という手法が開発されてきたが、これまでは十分な効率を実現するのが困難であった。最近の理研でのレーザー技術開発によりイオン化効率を 100 倍改善する見込みが生じている。更には、室温でも効率よくミュオニウムを放出するエアロゲル標的の開発が進み、室温ミュオン源の実用化が間近である。このビームの応用として、ミュオンを加速して超高精度磁場磁石内の周回軌道に蓄積してそのスピン歳差運動を測定することにより、ミュオン異常磁気能率(muon g-2)の高精度測定が可能である。この muon g-2 実験の概要についても述べる。

P-05　磯野 貴之

理化学研究所 加藤分子物性研究室
e-mail: takayuki.isono@riken.jp

2011 年 東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻修了
2011 年 東京大学物性研究所特任研究員
2013 年 物質・材料研究機構 NIMS ポスドク研究員
2016 年 理化学研究所　特別研究員

磁気トルクで見た三角格子有機磁性体の量子スピン液体状態

反強磁性的に相互作用するスピンを三角格子の各サイト上に並べたとき、三角形の二つの頂点のスピンの向きを決めると、三番目のスピンの向きが定まらなくなる。このような相互作用の競合（スピンフラストレーション）は、強磁性や反強磁性などの通常の磁気秩序を不安定にし、新奇な磁気状態や磁気現象を実現させる。近年、三角格子を有する幾つかの有機磁性体において、極低温まで磁気秩序が現れない“量子スピン液体”と呼ばれる特異な状態が発見され、注目されている。

本研究では、それらの物質の磁気トルク測定を行い、50 mK という極低温までの磁気的性質を調べた。κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu$_2$(CN)$_3$ という物質では、磁化率が広い温度・磁場範囲で単一の曲線に乗る（スケールされる）ことを発見した。この結果から、ゼロ磁場近傍に量子臨界点があること、磁化率の臨界指数が 0.8 であることを突き止めた。

P-06　今田 裕

理化学研究所　Kim 表面界面科学研究室
e-mail: himada@riken.jp

2004 年 ~ 2010 年　東工大　物性物理学専攻　博士課程
2010 年 ~ 2015 年　理研　特別研究員
2015 年 ~ 2017 年　理研　協力研究員
2017 年 ~　理研　研究員（現職）

Real-space investigation of intermolecular energy transfer dynamics

分子間エネルギー移動は、光合成を始めとする光エネルギー変換過程において非常に重要な現象である。しかし、エネルギー移動は分子がナノスケールにまで近接した状況でのみ起こるため、従来用いられている光学顕微鏡などでは、数 100 nm という光学的手法の空間分解能の限界から、詳細は未解明であった。

今回、走査トンネル顕微鏡（STM）をベースとした発光分光法（STM 発光分光法）を用いて、フタロシアニン（H_2Pc）とマグネシウムフタロシアニン（MgPc）の間のエネルギー移動の詳細を解明した [Imada *et al.*, *Nature* 538 (2016) 364]。二種類の分子が近接している場合、トンネル電流を流して直接励起している分子の発光に加えて、隣接する分子の発光も観測された。これは、一方の分子からもう一方へのエネルギー移動が起こったことを示している。電子状態と発光スペクトルに基づきエネルギーダイナミクスの詳細を議論する。

P-07　岡田 信二

理化学研究所　東原子分子物理研究室
e-mail: sokada@riken.jp

2004 年　理研　基礎科学特別研究員
2008 年　INFN-LNF(イタリア)　Post-doctoral fellowship
2012 年　理研　協力研究員

超伝導検出器を用いた原子分子ビーム計測に向けて

極低温静電型イオン蓄積リング(RICE-ring)において、超伝導遷移端(TES)マイクロカロリメータを、原子分子衝突からの中性生成物（原子・分子）の質量測定に応用する計画を進めている。本検出器は、入射粒子によって生じた吸収体における微量な温度上昇を、物質の常伝導から超伝導への急激な抵抗変化を利用し高感度で測定する熱量計である。有効面積は素子当たり~0.1 mm^2 と小さいが、近年の多素子化技術の発展により 20 mm^2 超を達成している。これまで 240 素子 TES を高分解能 X 線検出器として利用し、量子ビーム実験への応用実績[1,2]を積んできた。ここでは「光子」ではなく「粒子」の検出に応用する。本ポスター発表では、この多素子 TES 検出器の概要と本実験計画を紹介する。

[1] H. Tatsuno et al., J. Low. Temp. Phys. **184**, 930 (2016).
[2] S. Okada et al, Prog. Theor. Exp. Phys. **2016**, 091D01 (2016).

P-08　川椙 義高

理化学研究所　加藤分子物性研究室
e-mail: kawasugi@riken.jp

2010 年 埼玉大学大学院理工学研究科博士後期課程　単位取得退学
2010 年 大阪大学大学院基礎工学研究科　助教
2013 年 理化学研究所　研究員

イオン液体トランジスタによる分子性導体の超伝導相の探索

κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu[N(CN)$_2$]Cl は、バンド計算によれば部分的に満たされたエネルギーバンドを持つ金属であるにもかかわらず、電子間相互作用によって絶縁化している有機モット絶縁体である。我々のグループでは、このような物質に対してイオン液体トランジスタの原理を用いてキャリアドーピングを行っている。本研究ではキャリアドーピングによるバンドフィリング制御に加えて基板曲げひずみによるバンド幅制御を行い、どのようなドーピング領域で超伝導が現れるのかを調べた。その結果、超伝導が現れる領域はドーピングに対して非対称であることがわかった。超伝導相は電子ドープ側よりも正孔ドープ側のほうが広く、現在のところ、フェルミ面および擬ギャップにおけるドーピング非対称性との関連を示唆している。

P-09　神田 聡太郎

理化学研究所 仁科加速器研究センター 岩崎先端中間子研究室
e-mail: sohtaro.kanda@riken.jp

2013 年 理研 仁科センター岩崎研 ジュニアリサーチアソシエイト
2014 年 日本学術振興会特別研究員
2016 年 高エネルギー加速器研究機構リサーチアシスタント
2017 年 東京大学理学系研究科より博士(理学)取得
2017 年 理研 仁科センター岩崎研 基礎科学特別研究員

Precision microwave spectroscopy of muonium atom

ミュオンは電子の 200 倍, 陽子の 1/9 の質量を持つ第二世代の荷電レプトンであり、電子と同様に電荷 *e* と 1/2 のスピンを持つが、弱い相互作用を介して 2.2 μs の寿命で電子とニュートリノに崩壊する。水素原子が陽子と電子との束縛状態であるように、正ミュオンも電子と束縛してミュオニウムと呼ばれる原子様状態をとる。ミュオニウム原子の基底状態における超微細構造を精密にマイクロ波分光することで、束縛系における量子電磁力学の高精度検証や、基礎物理定数としてのミュオン質量の決定が可能である。ミュオニウムは内部構造を持たないレプトンの二体系であり、ミュオンのスピンが偏極した状態で実現可能な”極小の実験室”と見なすことができる。ポスターでは、J-PARC で行った分光実験の概要と結果について述べる。

P-10　Kim Sunghyun

理化学研究所　加藤分子物性研究室、北海道大学理学院
e-mail: sunghyun.kim@riken.jp

2013 年　Kookmin 大学院修士課程　修了
2015 年　北海道大学理学院博士課程　入学
2016 年　理化学研究所　実習生
2017 年　理化学研究所　JRA

Valence Bond Solid 物質 $EtMe_3P[Pd(dmit)_2]_2$ の電子スピン共鳴

我々は、電子スピン共鳴(ESR)法を用いて、*S*=1/2 の三角格子をもつスピン液体物質 β’-$EtMe_3Sb[Pd(dmit)_2]_2$ のミクロな電子状態をこれまでに明らかにしてきた。一方で、*S*=1/2 の三角格子をもつが β’-$EtMe_3Sb[Pd(dmit)_2]_2$ とは若干結晶構造が違う、$P2_1/m$ の $EtMe_3P[Pd(dmit)_2]_2$ は 25 K で Valence Bond Solid（VBS）となることが、静帯磁率の測定から分かっている。今回、この $EtMe_3P$ 塩のミクロな電子状態を調べるために ESR 測定を行ったので、その結果を報告する。*g* 値の角度依存性から、ESR は三角格子上のスピンをプローブしていることを確認し、ESR 積分強度の詳細な温度依存性を測定から、VBS 状態のスピンギャップを ΔE=135 K と見積った。今春合宿のポスター発表では、これらの結果を詳細に報告し、スピンギャップの磁場依存性の結果と合わせて、この系の基底状態を議論したい。

P-11　久間 晋

理化学研究所　東原子分子物理研究室
e-mail: susumu.kuma@riken.jp

2007 年　University of British Columbia(カナダ)　博士研究員
2010 年　岡山大学　助教
2014 年　理研　研究員

極低温分子イオンのダイミクス解明に向けて

我々が独自に開発した極低温静電型イオン蓄積リング(RICE-ring)を用いることで、内部温度を 4 K に制御した分子イオンダイナミクスを解明することが可能となった。4 K では分子イオンの振動回転まで冷却されるため、始状態を規定した孤立分子イオンの励起過程とそれに伴う多様な緩和過程を詳細に追跡することができる。本研究ではさらに低温でのダイナミクスを探索するために、温度 0.4 K にある超流動ヘリウム液滴を極低温媒質として用い分子イオンを冷却する。分子イオンは超流動媒質間との相互作用を通した冷却過程により急速に液滴温度まで冷却される。本報告では現在の研究概要を紹介するとともに、イオン蓄積リングとヘリウム液滴を融合させた新しい極低温ダイナミクス探索の可能性についても発表する。

P-12　倉持 光

理化学研究所　田原分子分光研究室
e-mail: h.kuramochi@riken.jp

2013 年　東京工業大学大学院 博士後期課程修了
2013 年　理化学研究所 基礎科学特別研究員
2016 年　理化学研究所 田原分子分光研究室 研究員

超高速時間領域ラマン分光法で観る光応答性タンパク質の反応初期過程

光応答性タンパク質の反応は光照射により同期を取ることが可能であるため、機能発現までの過程を時々刻々と追うことが出来る。そのため様々な光応答性タンパク質が機能・構造相関の観点から活発に研究されており、その機能発現の分子レベルでの仕組みに興味が持たれている。しかしながらこれら光応答性タンパク質の光吸収直後、フェムト秒～ピコ秒の領域におけるダイナミクスは観測法の限界から未だ不明な点が多く、この時間領域における発色団の構造変化やそれと連動したタンパク質局所構造の変化に関する情報が待ち望まれていた。そこで我々は極短パルスを用いることでフェムト秒の遅延時間精度で反応過渡状態にある分子のラマンスペクトルを得ることができる時間分解インパルシブラマン分光法を開発し、イエロープロテインや GFP をはじめとした光応答性タンパク質の反応初期過程におけるフェムト秒構造ダイナミクスを明らかにした。

P-13　崔 亨波

理化学研究所 加藤分子物性研究室
e-mail: hcui@riken.jp

1996 年　延辺大学薬学院（中国）助手
2003 年　分子研　CREST 研究員
2007 年　NHMFL（アメリカ）ポスドク研究員
2009 年　理研　基礎科学特別研究員
2012 年　理研　研究員

超高圧下による単一成分分子性結晶[Pt(dddt)$_2$]の金属化

通常、有機分子の単結晶は HOMO と LUMO のエネルギーギャップが大きいため絶縁体である。しかし、分子性結晶は結晶格子が柔らかく、圧力印加は新規金属あるいは超伝導体発見の非常に有効な手段である。今回、中心金属をスピン軌道相互作用が Pd より強いと予想される Pt に置換して、結晶作製を行い、ディラック電子系である Pd 塩と同型（type I）の単結晶と[Pt(dddt)$_2$]分子が弱いダイマーを形成し横方向に積層している構造を持つ（type II）単結晶が得られた。ダイヤモンドアンビルセル（DAC）を用いた四端子法により高圧下電気的性質測定を行った結果、type II の結晶は 9 GPa の圧力下で 2 K まで金属状態を保つことを発見した。また、第一原理バンド計算でも 10 GPa の圧力下において金属バンドが現れるという結果が得られ、type I の測定結果と併せて報告する。

P-14　佐藤 智哉

理化学研究所　仁科加速器研究センター　上野核分光研究室
e-mail: tomoya.sato@riken.jp

2016 年　理研　基礎科学特別研究員

キセノン原子 EDM 測定へ向けた
能動帰還型核スピンメーザーの開発

粒子に有限の永久電気双極子能率（EDM）が存在すれば時間反転不変性および荷電共役・パリティ（CP）対称性の破れの証左となる。標準模型における CP 対称性の破れが生む EDM は極めて小さい一方、多くの標準模型を超える理論では観測可能な大きさの EDM を予言する。よって EDM は新物理に対して選択的に感度を持ち、その探索に適した物理量である。

本研究では反磁性原子キセノン（Xe）原子を測定対象とする。EDM は電場を印加した際の核スピンラーモア歳差周波数の変化によって検出するが、現在の実験上限値を一桁以上更新する 10^{-28} ecm 領域での EDM 精密測定には約 1nHz の周波数精度が要求される。これを達成するため、独自の技術である能動帰還型核スピンメーザーを導入し核スピン歳差運動の長時間連続観測を行う。また、同一セルに封入した二種類の Xe 同位体、^{129}Xe と ^{131}Xe の同時メーザー発振・周波数比較によって磁場・温度等の環境変動の影響を打ち消すことを狙う。この発表では、^{129}Xe/^{131}Xe 同時メーザーの開発状況および同時メーザー周波数の測定環境への応答について報告する。

P-15　佐山 篤

東京工業大学大学院　理学院　化学系　化学コース
理化学研究所　田原分子分光研究室
e-mail:atsushi.sayama@riken.jp

2015 年 3 月 東京理科大学 築山研究室 卒業
2017 年 3 月 東京工業大学大学院 河内・北島研究室 修了
2017 年 4 月～ 東京工業大学大学院 大島研究室
理化学研究所 田原分子分光研究室 大学院リサーチアソシエイト

Optical isomer separation by FEL ＆ ultra low energy electron scattering from N_2O

本発表では学士課程および修士課程での研究内容を発表する。学士課程では赤外自由電子レーザー(FEL)を利用した光学異性体分離に関する研究を行った。それぞれの光学異性体で右回りおよび左回り円偏光の吸光度に微小ながら差があり、FEL を利用して赤外多光子解離を誘起させることで、一方の光学異性体を選択的に解離させることが可能ではないかと考えた。

修士課程では N_2O を対象とし、超低衝突エネルギー領域での電子衝突、Cold Collision と呼ばれる研究を行った。過去、いくつかの研究グループが N_2O の電子衝突全断面積を報告しているが、互いに値は異なっている。また衝突エネルギー約 200 meV までしか値が報告されていなかった。本研究により衝突エネルギー33 meV まで全断面積の値が得られた。

P-16　須田 理行

分子科学研究所・協奏分子システム研究センター
e-mail: msuda@ims.ac.jp

2008 年　日本学術振興会特別研究員 DC2 (慶應義塾大学)
2009 年　日本学術振興会特別研究員 PD (慶應義塾大学)
2010 年　理化学研究所　特別研究員
2011 年　理化学研究所　基礎科学特別研究員
2012 年　分子科学研究所　助教

光誘起界面双極子を利用した
光駆動型有機超伝導トランジスタの開発

スピロピラン誘導体はそのフォトクロミズムに巨大な双極子変化を伴う。従って、組織化されたスピロピラン単分子膜は、光照射により電気二重層キャパシタと類似の内部電界を誘起することが可能である。本研究では、ゲート基板上に正および負の双極子変化を示すスピロピラン単分子膜を作製し、κ-$(BEDT\text{-}TTF)_2Cu[N(CN)_2]Br$ (κ-Br) 薄片単結晶をチャネル層として貼り付けることで光駆動型電界効果トンランジスタを作製した。実際に、光照射により κ-Br への光誘起電子ドーピングおよびホールドーピングとこれらに伴う超伝導転移をそれぞれ観測することに成功した。

P-17　SURBLYS Donatas

理化学研究所 杉田理論分子科学研究室
e-mail: donatas.surblys@riken.jp

2014 年　大阪大学大学院工学研究科機械工学専攻博士後期課程修了
2014 年　大阪大学大学院工学研究科　特任研究員
2014 年　(兼) Darmstadt 工科大学(ドイツ) 客員研究員
2016 年　理化学研究所　特別研究員

Vibrational Analysis of Aromatic Polyamide Reverse Osmosis Membranes

Aromatic polyamide reverse osmosis (RO) membranes that possess a high salt rejection rate of over 99 % are presently the most widely used desalination method. However, membrane fouling and high operational pressure is incurring the running cost of filtration plants, preventing further spread of this technology. To provide insight that would lead to better design of RO membranes, weight averaged vibrational analysis method developed by us is used on model RO membranes constructed by molecular dynamics simulation. With this method, we obtain the IR spectra of RO membranes at various moisture conditions. This allows the investigation of how water and polyamides interact inside the RO membranes and assignment of IR spectra obtained experimentally from commercial filtration membranes, which offers insight into the mechanism and factors that determine membrane filtration properties.

P-18　武田 英恵

兵庫県立大学大学院　生命理学研究科　生命科学専攻
e-mail:　hn358-hahaha@spring8.or.jp

～2015 年　兵庫県立大学　理学部生命科学科
～2017 年　兵庫県立大学大学院　生命理学研究科博士前期課程
2017 年～　兵庫県立大学大学院　生命理学研究科博士後期課程
　　理化学研究所　大学院生リサーチ・アソシエイト(JRA)

時間分解分光法を用いた一酸化窒素還元酵素の触媒反応機構の解明

一酸化窒素還元酵素(NOR)は、微生物の嫌気呼吸の一種である脱窒において、細胞毒性の高い一酸化窒素 NO を電子とプロトンを用いて N_2O に還元している。NOR は、ヘム鉄および非ヘム鉄により構成された活性中心において NO 還元反応を触媒することが明らかにされている。NO 還元反応ではまず、2 分子の NO が活性中心に配位し、N-N 結合の生成および N-O 結合の開裂という 2 つの化学反応が起こるが、触媒反応機構は未解明である。我々は現在、ケージド NO を用いた時間分解赤外吸収測定により、活性中心に結合した NO の NO 伸縮振動の信号強度の時間変化を追跡することで、NO が N_2O へと還元されていく化学反応過程を直接観測することを目指している。発表では、時間分解可視吸収測定による速度論解析の結果も併せて、NOR の触媒反応機構について議論する。

P-19　圓谷 貴夫

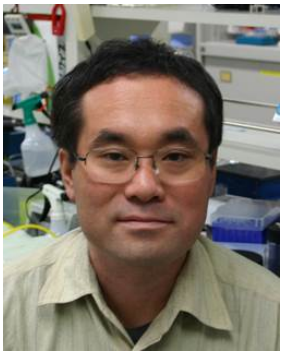
物質・材料研究機構　若手国際研究センター (ICYS)
理化学研究所 加藤分子物性研究室
e-mail: TSUMURAYA.Takao@nims.go.jp

2009 年　広島大学 大学院 先端物質科学研究科 博士課程 修了
2009 年　ノースウェスタン大学（アメリカ）ポスドク研究員
2011 年　理研　特別研究員
2015 年　物質・材料研究機構 ICYS 研究員

ハイブリッド汎関数法による分子性導体の磁性と電子状態

第一原理計算において、密度汎関数理論(DFT)の枠組みで一般的に用いられている局所密度近似(LDA)や一般化密度勾配近似(GGA)に基づく計算をMott絶縁体や電荷秩序相といった強相関絶縁体物質に対して実行すると、電子を過剰に非局在化させる傾向があるため、実験結果に反して金属的なバンド構造が得られてしまうことが多い。これはLDAやGGAにおける自己相互作用の問題として知られており、分子性導体においては解決されていない。本研究では、分子性導体β'-(BEDT-TTF)$_2$ICl$_2$のMott絶縁体相および(TMTTF)$_2$*X*系の電荷秩序相に対し、まずスピン分極を考慮したGGAによる計算を行うことによって反強磁性状態の安定性を見る。その上で、DFTにハートレーフォック法の厳密な交換項を取り入れるハイブリッド汎関数法 (HSE06)に基づく第一原理計算手法を用いて磁性と電子状態を調べた結果を報告する。

P-20　當舎 武彦



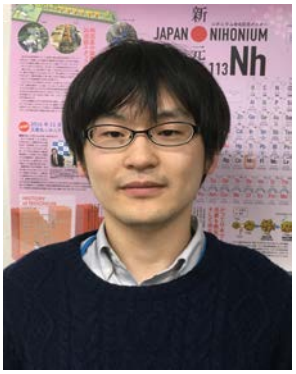
理研 RSC ビームライン基盤研究部
生命系放射光利用システム開発ユニット
e-mail: ttosha@spring8.or.jp

～2003 年　京都大学大学院分子工学専攻　博士課程
～2006 年　岡崎統合バイオサイエンスセンター　博士研究員
～2009 年　米国 Children's Hosp. Oakland Res. Inst.　博士研究員
～2010 年　理研 RSC　特別研究員
～2012 年　理研 RSC　研究員
～現在　理研 RSC　専任研究員

SACLA を利用した時間分解 X 線結晶構造解析による酵素反応の観測

酵素タンパク質は、常温・常圧といった温和な条件で、高効率・高選択的に化学反応を触媒する。そのため、酵素反応機構の解明は、生命現象の理解につながるだけでなく、高活性をもつ触媒分子の設計にも有用である。酵素反応機構を理解するためには、酵素反応の途中に過渡的かつ準安定的に形成される反応中間体の構造決定が重要となるが、従来の構造解析の手法では、短寿命な反応中間体の構造を決定することは難しい。そこで、本研究では、X 線自由電子レーザー（XFEL）施設 SACLA を利用し、酵素反応における反応中間体の構造を決定するための時間分解 X 線結晶構造解析の手法の確立に取り組んだ。

P-21　西畑 洸希



理化学研究所　上野核分光研究室
e-mail: hiroki.nishibata@riken.jp

2013 年 大阪大学大学院理学研究科物理学専攻修士課程修了
2016 年 大阪大学大学院理学研究科物理学専攻博士課程修了
2016 年 学術振興会特別研究員(PD)、理化学研究所訪問研究員

核スピン偏極を用いた原子核構造研究

原子核は陽子と中性子で構成されるフェルミオン量子有限多体系であり、ある特定の陽子・中性子数(魔法数)で比較的安定となる殻構造や大きく形がゆがんだ変形状態など、様々な原子核構造が出現する。特に、陽子数に比べ中性子数が極端に多い（中性子過剰な）不安定原子核ではどのような構造が現れるのかということは、現在の原子核物理学の重要課題の一つである。このような原子核構造を調べるためには、スピンがある方向に揃った(スピン偏極した)原子核を用いるのが非常に有効である。スピン偏極した原子核から放出されるベータ線などの放射線は空間的な異方性を持ち、それの異方性を測定することで原子核のスピンや原子核電磁気モーメントなど様々な情報を得ることができる。スピン偏極を用いた原子核研究の一例として、スピン偏極した ^{31}Na を用いた中性子過剰な ^{31}Mg 原子核の構造の研究について報告する。それに加え、今後計画している理化学研究所の RIBF 施設でのスピン偏極を用いた研究についても紹介する。

P-22　早澤 紀彦

理化学研究所　Kim 表面界面科学研究室
e-mail: hayazawa@riken.jp

2001 年大阪大学大学院工学研究科応用物理学専攻修了・博士（工学）
2001~2002 年　日本学術振興会特別研究員
2002~2004 年　科学技術振興機構ポスドク
2004~2009 年　理化学研究所・研究員
2009~現在　　理化学研究所・専任研究員

環境制御下での先端増強ラマン分光法の開発

先端増強ラマン分光法(TERS)では、微弱な信号であるラマン散乱光を局所的に増強し検出する。この局所ナノ光源を創り出す手法としてナノサイズの金属針を用い、そこに光を照射すると、自由電子の集団的振動（プラズモン）が誘起される。その際、針の先端において電界の集中が起き、増強電場が発生し、局所的に微弱な信号を増幅し検出できる。最新の成果では、波長 633nm の光を用いて、カーボンナノチューブを 1.7nm の空間分解能で TERS 分光イメージングを可能とし、常温大気中におけるラマン分光の世界記録となっている。本手法を多様な試料に適応させ、分析技術として意味のあるものにするには、用途にあった多様な環境制御下での開発が必須となる。現在、常温大気中での開発を土台として、超高真空・極低温環境～常温大気中～ガス環境制御下～液中のそれぞれで装置開発を行っており、ここでは、液中以外の開発状況についての報告を行う。

P-23　久野 玉雄

理化学研究所放射光科学総合研究センター
ビームライン研究基盤部
生命系放射光利用システム開発ユニット
e-mail: hisano@riken.jp

1997 年　京都大学大学院理学研究科博士号取得後退学
1997 年～2000 年　理化学研究所和光研究所ポスドク
2000 年～現在　理化学研究所 SPring-8 センター（専任）研究員

ＡＢＣヘム排出ポンプの構造と機能

ヘムは生命活動にとって必須の鉄を含む物質である。細胞内ではヘモグロビンや様々なタンパク質と結合して、酸素分子の結合や生体化学反応の触媒中心として働く。一方、遊離ヘムはその化学反応性や疎水性のために細胞にとって毒でもある。病原菌がヒトに感染すると、ヒトのヘムから鉄を獲得すると同時に、細胞内に侵入した遊離ヘムを細胞外に排出してヘム毒性を回避する。ヘム排出ポンプというタンパク質が細胞膜に存在し、ATP の加水分解エネルギーを利用してヘムを排出している。ヘム排出ポンプが働く際のヘムの認識機構や輸送機構を解明することにより、物質輸送を担う膜タンパク質の新たなメカニズムを提唱することを目指す。今回は、ヘム排出ポンプの新規な結晶構造を報告する。

P-24　藤田 朋美

上野核分光研究室 / 大阪大学理学研究科 下田研究室
e-mail: tomomi.fujita@riken.jp

2014 年～　大阪大学大学院 理学研究科 博士課程後期 入学
2016 年～　理化学研究所 JRA

レーザー・マイクロ波二重共鳴法による超流動ヘリウム環境中 Au 原子の超微細構造間隔

本研究ではバルクの超流動ヘリウム液中に安定 Au 原子を導入し、レーザー・マイクロ波二重共鳴法による超微細構造間隔の測定を行った。超微細構造は原子核の核スピンの磁気モーメントと電子雲が原子核の位置に作る磁場との相互作用によって生じる原子副準位であり、超流動ヘリウム環境中の原子では周囲のヘリウム原子による不純物原子の電子雲への影響を敏感に反映すると考えられる。今回、得られた結果は真空中における値と比べて、1%未満とわずかではあるが増加していた。アルカリ原子である Cs 原子、Rb 原子でも同様の現象が報告されているが、その変化量は各元素によって異なり、Au 原子はアルカリ原子よりも小さいことがわかった。

ここでは本研究の詳細と内殻電子の構造の違いから超流動ヘリウム環境が不純物原子に与える影響について議論する。

P-25　藤田 雅弘

理化学研究所 前田バイオ工学研究室
e-mail: mfujita@riken.jp

2001 年　理研 協力研究員
2001 年　理研 研究員
2011 年　理研 専任研究員

DNA ナノ粒子の分散・凝集と枯渇効果

DNA で表面を密に覆われたナノ粒子は、DNA 構造の違いに応答してそのコロイド分散安定性が変化するという界面現象を示す。このコロイド分散安定性の特異性は DNA 層の熱運動に起因するエントロピックな反発力の差異によるものと考えられるが、詳細は不明なままである。系中にポリエチレングリコール（PEG）を添加することでナノ粒子間に枯渇引力を誘起すると、安定的に分散している粒子も凝集しうることを見出した。本研究では、枯渇効果を利用してナノ粒子間の反発力の差異を評価することで、特異な界面現象のメカニズムを明らかにすることを目的とする。

P-26　藤山 茂樹

理化学研究所 加藤分子物性研究室
e-mail: fujiyama@riken.jp

2001 年　東京大学大学院理学系研究科物理学専攻修了
2001 年　岡崎国立共同研究機構分子科学研究所 助手
2004 年　東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 講師
2008 年　理化学研究所 高木磁性研究室 専任研究員
2013 年　理化学研究所 加藤分子物性研究室 専任研究員

バンドギャップ内に存在する連続磁気励起

金属錯体(Cation)[Pt(dmit)$_2$]$_2$ は電気抵抗と磁化率の測定から T = 160 ~ 220K で構造相転移を伴った金属絶縁体転移を示す。転移温度以下では 0.3eV 以上のバンドギャップが開いており電荷および磁気励起の自由度は消失している。われわれはこの物質の電子状態を微視的に調べるため、^{13}C にラベルされた試料を用いて NMR 測定を行った。この結果、電子スピンの静的情報を与える NMR 線幅は巨視的磁化率に比例し、スピン自由度の消滅を支持するものの、動的情報を与える核スピン格子緩和率($1/T_1$, ~10^{-7}eV の揺らぎ)および核スピンスピン緩和率($1/T_{2g}$, ~10^{-10}eV の揺らぎ)は最低温度まで励起スペクトルが残っていることを示した。特に $1/T_1$ は低温で温度に比例するいわゆる Korringa 則に従う温度依存性を示し、大きなバンドギャップの内部にフェルミディラク統計に従う非自明な連続磁気励起が存在することがわかった。

P-27　Dita Puspita Sari

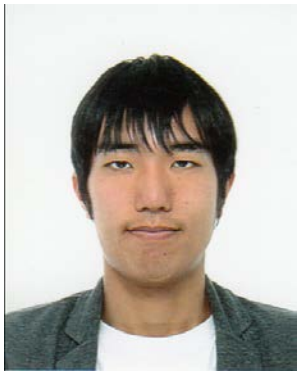
RIKEN Advanced Meson Science Laboratory
e-mail: dita.puspitasari@riken.jp

2013 Tenth of November Institute of Technology
Surabaya, Indonesia, Master (Physics)
2015 Junior Research Associate, RIKEN
2017 Osaka University, D3 (Physics)

Organic Superconductor λ-$(BETS)_2GaCl_4$ Study by Muon Spin Rotation

The appearance of two bands crossing the Fermi level and the short coherence length of organic superconductors (SC) lead to the observation of two gaps. However, recent experimental studies give differently debatable results, especially on λ-$(BETS)_2GaCl_4$ which has the highest T_c = 5 K among reported λ-type organic SC containing Se atoms. A bunch polarized muon injected to the bulk λ-$(BETS)_2GaCl_4$ sample is very sensitive to the field distribution of superconducting flux line lattice in fields of 30 G and 60 G down to the temperature at 0.3 K. From this muon spin rotation (μSR) spectroscopy conducted at RIKEN-RAL Muon Facility in the UK we observed the possibility of mixture *s*- and *d*- wave pairing symmetry of this compound and will report the results.

P-28　村杉 英昭



東北大学大学院理学研究科　錯体化学研究室
e-mail:hideaki.murasugi.t5@dc.tohoku.ac.jp

2017 年 3 月　東北大学理学部化学科卒業
2017 年 4 月　東北大学大学院理学研究科

低次元金属錯体におけるバンドフィリング制御と熱電特性の評価

近年、エネルギー消費量の増加に伴い化石燃料が枯渇の危機に瀕していることが明らかにされてきた。この状況を打開する上で、熱電変換デバイスが注目を集めてきている。このデバイスは熱を電気に直接変換するものであり、その熱源には排熱などが使用可能である。これまで有望な熱電材料として研究されてきたのはビスマス-テルル系を始めとする無機材料であったが、最近では低次元系の物質も有望であることが明らかにされてきた。低次元金属錯体も同様に熱電材料としてのポテンシャルを秘めてはいるものの、その熱電特性を評価した例というのは未だ多くない。今回はそういった化合物の熱電特性について報告を行う。

P-29　八木 清

理化学研究所　杉田理論分子科学研究室
e-mail:　kiyoshi.yagi@riken.jp

2004 年　東京大学工学系研究科応用化学専攻　博士号（工学）取得
2005 年　東京大学工学系研究科応用化学専攻　助手・助教
2009 年　山梨大学燃料電池ナノ材料研究センター　講師
2011 年　米国イリノイ大学アーバナシャンペーン校
　　Research Assistant Professor
2012 年　理化学研究所杉田理論分子科学研究室　研究員
2015 年　理化学研究所杉田理論分子科学研究室　専任研究員

QM/MM 法に基づく反応経路探索法の開発と酵素反応への応用

酵素反応は、常温・常圧のマイルドな条件にも関わらず、目的の反応を高い選択性と収率で実現させており、その分子機構を理解することは極めて重要である。これまで、反応系を量子化学計算（QM）で、タンパク質環境を分子力場（MM）で扱うハイブリッド QM/MM 法を当グループで開発しているプログラム GENESIS に実装した。本研究では、QM/MM 法に基づき、反応経路を探索する方法を開発し、酵素反応へ応用する。

P-30　山際 来佳

兵庫県立大学大学院　生命理学研究科
e-mail: raika_yamagiwa@spring8.or.jp

2016 年　兵庫県立大学大学院 生命理学研究科 博士後期課程
　　理研 大学院生リサーチ・アソシエイト(JRA)

一酸化窒素還元酵素の基質輸送経路に存在するアミノ酸残基の役割

一酸化窒素還元酵素とは細菌の嫌気呼吸の過程で一酸化窒素（NO）を亜酸化窒素（N_2O）に還元する反応を触媒する膜タンパク質である。この酵素の X 線結晶構造から基質輸送経路と考えられる疎水性チャネルが確認できたが、基質輸送機構については未解明である。本研究では、この酵素の活性中心へと続く疎水性チャネルの近傍に存在するアミノ酸残基について機能解析を行い、基質輸送機構の解明を目指した。その結果、このアミノ酸残基は基質輸送だけでなく、NO 還元反応にも関与していることを明らかにした。本発表では、これらのアミノ酸残基の役割と触媒反応機構の相関について議論したい。

P-31　山田 健太

理化学研究所 杉田理論分子科学研究室
e-mail: kenta.yamada@riken.jp

2012 年　学位 博士（情報科学）取得　名古屋大学
2012 年　横浜市立大学 生命ナノシステム科学研究科 特任助手
2013 年　京都大学 福井謙一記念研究センター 特推研究フェロー
2015 年　理化学研究所 杉田理論分子科学研究室 特別研究員

NOR が関わる複合体の構造安定性と機能の理論解析

一酸化窒素還元酵素(NOR)は、嫌気下で脱窒過程($NO_3^- \rightarrow NO_2^- \rightarrow NO \rightarrow N_2O \rightarrow N_2$)の 1 ステップである NO 還元反応を触媒する。緑膿菌の形質膜に存在する膜貫通型タンパク質の NOR は、NO 生成を担う亜硝酸還元酵素(NiR)と複合体として存在している可能性が、X 線結晶構造解析によって示唆された。この複合体構造は結晶化過程に起因しないことを示すために、全原子分子動力学計算を用いて、緑膿菌のモデル生体環境における NiR:NOR 複合体構造の安定性を議論してきた。さらに、量子化学計算によって、ヘムと非ヘム鉄を含む NOR 活性部位で起こる NO 還元反応($2NO + 2H^+ + 2e^- \rightarrow N_2O + H_2O$)の反応機構を検討してきた。当日は、これらの計算結果の詳細を報告する。

P-32　余 力

理化学研究所　前田バイオ工学研究室
e-mail: li.yu@riken.jp

2010 年　南京大学化学化工学院卒業
2013 年　北海道大学大学院総合化学院修士課程修了
2013 年　株式会社カネカ（上海支社）入社
2016 年　東京大学大学院新領域創成科学研究科博士課程進学
　　理化学研究所 国際プログラムアソシエイト

Self-organization of DNA-coated Gold Nanoparticle Assemblies through Non-crosslinking Aggregation

Highly ordered assemblies of gold nanoparticles (AuNPs) with manipulable configurations are expected as dynamic nanodevices. A linear assembly of DNA-coated AuNPs, which is prepared using a long template DNA, undergoes structural shrinkage through non-crosslinking aggregation with complementary DNA. This gives rise to the structural conversion from linear to island-like configuration on the substrate surface, suggesting that the constraint effect by the template DNA plays a significant role. This finding could contribute to the novel method to readily construct two-dimensional AuNP arrays.

P-33　横田 泰之

理化学研究所 Kim 表面界面科学研究室
e-mail: yyokota@riken.jp

2007 年　理研　基礎科学特別研究員
2009 年　阪大　助教
2015 年　理研　研究員

電気化学界面の探針増強ラマン分光

近年、SPM に匹敵する高分解能で表面の振動分光測定が可能であり、且つ測定環境を選ばないことから、探針増強ラマン分光(Tip-enhanced Raman spectroscopy)が注目を集めている。特に、2009 年に Zenobi らのグループによって最初の水中 TERS 測定の結果が報告されて以来、溶液環境で動作する TERS システムの開発が活発化している。電気化学環境下の TERS (EC-TERS)についても数例の報告例があるが、ラマンイメージングを行うためには課題が山積しているのが現状である。本発表では、我々の EC-TERS システムの開発について報告し、高分解能イメージングに向けた課題について述べる。

P-34　Taehoon Lee

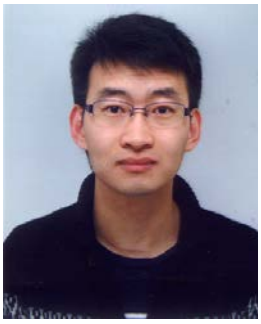
Condensed Molecular Materials Laboratory, RIKEN
e-mail: taehoon.lee@riken.jp

2010 年　Kookmin University (Korea), Master Course
2015 年　Hokkaido university, Doctoral Course
2016 年　Condensed Molecular Materials Laboratory, RIKEN
2016 年　Junior Research Associate, RIKEN

Observation of the anomalous antiferromagnetic resonance in λ-$(BETS)_2FeCl_4$

λ-$(BETS)_2FeCl_4$ consists of the conducting π-electrons of BETS molecules and the localized d-electrons of Fe^{3+} ions, and strong π-d interaction is expected owing to the short contacts between BETS molecules and $FeCl_4$. Although λ-$(BETS)_2FeCl_4$ shows simultaneously a metal to insulator transition and antiferromagnetic long-range order at 8.3 K, the origin of this antiferromagnetic insulating (AFI) phase is under debate for the past few decades. We have performed ESR measurements in the AFI phase λ-$(BETS)_2FeCl_4$, and have observed anomalous behavior of the antiferromagnetic resonance where the easy-axis seems to change with temperature and field. In my poster, I will introduce our measurement results and discuss about the AFI ground state.

P-35　王 国慶



理化学研究所　前田バイオ工学研究室
e-mail: guoqing.wang@riken.jp

2012 年　JSPS 特別研究員（DC2）
2013 年　北海道大学総合化学院博士課程 修了
2013 年　University of California, Riverside 博士研究員
2014 年　理化学研究所 前田バイオ工学研究室 特別研究員
2017 年　同上、基礎科学特別研究員

DNA 修飾金ナノ粒子集合体の配向制御

二重鎖 DNA で表面修飾したナノ粒子は高イオン強度下で自発的に凝集するが、DNA 末端がミスマッチの場合は強く抑制される。これに基づいて、領域選択的に DNA で修飾した形状異方性をもつ金ナノ粒子（ナノロッド、ナノプレート、ナノキューブ）を配向制御して集合させた。これらの集合体は、DNA で修飾していない金ナノ粒子の集合体と比較して、配向性が高く会合数も大きくなることが強く示唆された。

研究会参加者

東 俊行

理化学研究所 東原子分子物理研究室
e-mail: toshiyuki-azuma@riken.jp

1988 年　東京大学大学院工学系研究科原子力工学専攻博士課程修了
1988 年　チューリヒ大学およびスイス連邦工科大学　博士研究員
1989 年　東京大学教養学部　助手
1998 年　筑波大学物理工学系　助教授
2000 年　東京都立大学理学部　助教授
2005 年　首都大学東京都市教養学部　教授
2009 年　理化学研究所　主任研究員

岩崎 雅彦

理化学研究所　岩崎先端中間子研究室
e-mail: advanced_meson@riken.jp

1986 年　日本学術振興会 特別研究員
1987 年　東京大学大学院　理学系研究科物理学専門課程
　　第一種博士課程　終了
1987 年　東京大学理学部附属 中間子科学研究施設 助手
1989 年　東京大学理学部附属 中間子科学研究センター 助手
1997 年　東京工業大学大学院 理工学研究科 基礎物理学専攻 助教授
2002 年　理化学研究所　主任研究員・東京工業大学大学院 理工学研究科 基礎物理学専攻
　　連携教授

上坂 友洋

理化学研究所　上坂スピン・アイソスピン研究室
e-mail: uesaka@riken.jp

上野 秀樹

理化学研究所 上野核分光研究室
e-mail: ueno@riken.jp

1995 年　東京工業大学大学院博士退 (1996 博士（理学）)
1995 年　阪大理 助手
2000 年　理研 応用原子核物理研究室 研究員
2009 年　理研 仁科セ 偏極 RI ビーム生成装置開発チームリーダー
2010 年　理研 仁科セ 共用促進・産業連携部 副部長
2013 年　理研 仁科セ 上野核分光研究室 主任研究員（現職）
2016 年　理研 仁科セ 実験装置運転・維持管理室長（現職）

加藤 礼三

理化学研究所 加藤分子物性研究室
e-mail: rezo@riken.jp

1984 年　東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了
1984 年　東邦大学理学部　助手
1988 年　東邦大学理学部　講師
1990 年　東京大学物性研究所　助教授
1999 年　理化学研究所　主任研究員

金 有洙

理化学研究所　Kim 表面界面科学研究室
e-mail: ykim@riken.jp

1999 年　東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻博士課程修了
1999 年　理化学研究所　表面化学研究室　協力研究員
1999 年　理化学研究所　表面化学研究室　基礎科学特別研究員
2002 年　理化学研究所　川合表面化学研究室　研究員
2006 年　理化学研究所　川合表面化学研究室　先任研究員
2007 年　理化学研究所　川合表面化学研究室　専任研究員
2010 年　理化学研究所　Kim 表面界面科学研究室　准主任研究員
2015 年　理化学研究所　Kim 表面界面科学研究室　主任研究員

酒見 泰寛

東京大学大学院理学系研究科附属原子核科学研究センター
e-mail: sakemi@cns.s.u-tokyo.ac.jp

1993 年　京都大学大学院理学研究科物理学第二専攻博士課程修了
1993 年　東京工業大学大学院理工学研究科　助手
2001 年　大阪大学核物理研究センター　助教授
2006 年　東北大学サイクロトロン・ラジオアイソトープセンター　教授
2016 年　東京大学大学院理学系研究科附属原子核科学研究センター　教授

笹野 匡紀

上坂スピン・アイソスピン研究室
e-mail: sasano@ribf.riken.jp

2005年　日本学術振興会、特別研究員
2008年　理学博士号（東京大学）取得
2008年　東京大学大学院理学系研究科 特任研究員
2009年　理化学研究所基礎科学特別研究員
2010年　米国・ミシガン州立大学　客員研究員
2011 年　理化学研究所仁科加速器センター 研究員

城 宜嗣

兵庫県立大学大学院生命理学研究科
e-mail: yshiro@sci.u-hyogo.ac.jp

1985 年　京都大学工学研究科石油化学専攻　博士後期課程　修了
　　工学博士　取得
1985 年　日本学術振興会特別研究生
1987 年　理化学研究所　研究員
1993 年　理化学研究所　副主任研究員
2000 年　理化学研究所　主任研究員（～2017 年）
2015 年　兵庫県立大学　教授

杉田 有治

理化学研究所　杉田理論分子科学研究室
e-mail: sugita@riken.jp

1998 年　京都大学大学院理学研究科化学専攻博士過程修了
1998 年　理化学研究所奨励研究員
1998 年　分子科学研究所助手
2002 年　東京大学分子細胞生物学研究所講師
2007 年　理化学研究所杉田理論生物化学研究室准主任研究員
2012 年　理化学研究所杉田理論分子科学研究室主任研究員（現職）
2010 年　理化学研究所計算科学研究機構チームリーダー、生命システム研究センターチームリーダーを兼任

田原 太平

理化学研究所 田原分子分光研究室
e-mail: tahei@riken.jp

1989 年　東京大学理学系大学院化学専攻 博士課程修了
1989 年　東京大学理学部化学教室 助手
1990 年　神奈川科学技術アカデミー
　　極限分子計測プロジェクト 研究員
1995 年　岡崎国立共同研究機構 分子科学研究所 助教授
2001 年　理化学研究所 主任研究員

時任 宣博

京都大学化学研究所　物質創製化学研究系
e-mail: tokitoh@boc.kuicr.kyoto-u.ac.jp

1985 年　東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士後期課程修了
1986 年　筑波大学　化学系文部技官／1987 年　同助手
1989 年　東京大学理学部　助手
1993 年　東京大学大学院理学系研究科助手／1994 年　同助教授
1998 年　九州大学有機化学基礎研究センター　教授
2000 年　京都大学化学研究所　教授（現在に至る）
2005 年　京都大学化学研究所　副所長（～2008）
2006 年　京都大学次世代開拓研究ユニット　ユニット長（～2008）
2008 年　京都大学化学研究所　所長（～2012）
2014 年　京都大学化学研究所　所長（現在に至る）

藤井 正明

東京工業大学科学技術創成研究院化学生命科学研究所
e-mail: mfujii@res.titech.ac.jp

1985 年　東北大学理学部・助手（化学科）
1987 年　学位取得（理学博士）
1988 年　日米科学技術協力事業派遣研究研究員（Cornell 大）
1993 年　早稲田大学理工学部・助教授（化学科）
1993-1996 年　新技術事業団さきがけ 21 研究員
1997 年　岡崎国立共同研究機構分子科学研究所・教授
1999-2009 年　同研究所分子制御レーザー開発研究センター長併任
1993 年　東京工業大学資源化学研究所・教授
2007-2011 年科研費特定領域研究「高次系分子科学」領域代表
2016 年　東京工業大学科学技術創成研究院・教授（現職、組織変更による）

前田　瑞夫

理化学研究所　前田バイオ工学研究室
e-mail: mizuo@riken.jp

1978 年　東京大学工学部卒
1983 年　東京大学大学院工学系研究科修了・工学博士
1983 年　東京大学工学部　助手
1988 年　九州大学工学部　助教授
1995 年　九州大学大学院工学研究科　教授
2001 年　理化学研究所　主任研究員

山崎 泰規

理化学研究所 Ulmer 基本的対称性研究室
yasunori@riken.jp

1978 年　大阪大学大学院工学研究科応用物理学専攻
　　博士課程修了　工学博士
1978 年　東京工業大学 原子炉工学研究所 助手
1988 年　東京大学 教養学部 物理学教室 助教授
1996 年　東京大学 教養学部 物理学教室 教授
1997 年　理化学研究所 原子物理研究室 主任研究員（非常勤）
2010 年　理化学研究所　基幹研究所　上席研究員
2015 年　理化学研究所　副理事（研究政策審議役）
2017 年　理化学研究所　Ulmer 基本的対称性研究室　研究員

山下 正廣

東北大学原子分子材料科学高等研究機構(WPI-AIMR)
e-mail: yamasita.m@gmail.com

1985 年　九州大学教養部助手
1987 年　名古屋大学教養部講師
1989 年　名古屋大学情報文化学部助教授
1989 年　ロンドン大学化学教室客員教授（1 年間）
1998 年　名古屋大学大学院人間情報研究科
1999 年　東京都立大学大学院理学研究科教授
2004 年　東北大学大学院理学研究科化学専攻教授
2016 年　東北大学原子分子材料科学高等研究機構(WPI-AIMR)教授（現在に至る）

山本 浩史

分子科学研究所　協奏分子システム研究センター
e-mail: yhiroshi@ims.ac.jp

1998 年　東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了
1998 年　学習院大学理学部　助手
1999 年　理化学研究所　基礎科学特別研究員
2000 年　理化学研究所　研究員
2007 年　理化学研究所　専任研究員
2012 年　分子科学研究所　教授
2012 年　総合研究大学院大学　教授
2012 年　東京工業大学　特任教授
2015 年　東北大学　教授（委嘱）

吉信 淳

東京大学物性研究所 機能物性グループ＆ナノスケール物性部門
e-mail: yoshinobu@issp.u-tokyo.ac.jp

1989 年　京都大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了
1989 年　ピッツバーグ大学化学科博士研究員（J. T. Yates, Jr. 研究室）
1991 年　理化学研究所 基礎科学特別研究員（青野表面界面工学研究室）
1992 年　理化学研究所 研究員（川合表面化学研究室）
1996 年　理化学研究所 副主任研究員（川合表面化学研究室）
1997 年　東京大学物性研究所 助教授
2007 年　東京大学物性研究所 教授