

# 2019-20 基礎科学特別研究員年報

Special Postdoctoral Researcher Program  
2019-20 Annual Report



RIKEN's  
Programs for  
Junior Scientists

国立研究開発法人

理化学研究所



2019-20

# 基礎科学研究員年報

Special Postdoctoral Researcher Program

2019-20 Annual Report

**国立研究開発法人理化学研究所**

〔凡例〕

各研究報告の末尾に揚げた誌上発表（Publications）の原著論文等のうち、\*印を付したものは査読精度がある論文誌であることを示します。

[Note]

In the list of Publications (original papers) at the end of each report, those marked with an asterisk (\*) indicate peer review journals.

## はじめに

本年報は、理化学研究所に在籍する基礎科学特別研究員の令和元年度における研究報告です。制度の概要については、以下のとおりです。

### <設立の経緯>

今後の科学技術を飛躍的に発展させ、わが国が豊かな社会を築き国際社会に貢献していくためには、創造性豊かな科学技術の発展が不可欠となっています。このような状況を踏まえ平成元年度の新たな施策として、科学技術庁（現 文部科学省）と理化学研究所が連携して独創的・基礎的研究を強力に推進する基礎科学特別研究員制度を創設しました。その後の定員の拡充等制度の充実に伴い、本制度の運用は平成7年度より理研に全面移管されています。平成19年度に創設された基礎科学特別研究員制度の外国人版である国際特別研究員と、平成28年度より統合し、より世界に開かれた、優秀な若手研究者を支援する制度として新たなスタートを切りました。

### <制度の内容>

本制度は、理化学研究所が、創造性、独創性に富む優れた若手研究者に自主的に研究できる場を与え、その力を十分に発現させることにより基礎科学発展の担い手として活躍を期待する制度です。対象とする研究分野は、数理科学、物理学、化学、生物科学、医科学、工学の学際的分野を含む科学技術分野で、理研で実施可能な研究です。

対象者は博士号取得者で、自らが理研において実施を希望する研究課題と理研の研究領域を勘案して設定した研究課題を自主的に遂行する意志のある者です。毎年、公募により募集を行い、所内研究者と外部有識者で構成される委員会で審査（書類審査、面接審査）・選考を行っています。平成30年度に採用された方より3年間の複数年契約を締結し、更に安定して研究に集中することが可能な環境が整えられました。

基礎科学特別研究員の受け入れにあたっては、研究課題を自主的に遂行できるよう受入研究室を定めて、必要な研究スペースの確保、研究施設及び設備の利用について便宜を図り、基礎科学特別研究員は所属長から助言を受けることができます。

平成20年10月からは育児休業取得者に対する在籍期間延長など規程の見直しもおこない、本制度においてより良い研究環境を提供できるよう、ワークライフバランスにも配慮しています。

これまでに、1,730名の基礎科学特別研究員、153名の国際特別研究員（平成30年度で受入終了）を受け入れており（令和2年3月現在）、現在の在籍者数は基礎科学特別研究員140名となっています。（令和2年9月現在）

令和2年9月

国立研究開発法人理化学研究所

# Foreword

This Annual Report is a compilation of the research reports submitted by the Special Postdoctoral Researchers (SPDRs) working at RIKEN in fiscal 2019. The outline of the programs is as follows.

## The programs

Creativity is required for the rapid advance of science and technology that will benefit Japanese society and contribute to the international community. To fill this need, RIKEN, in collaboration with the former Science and Technology Agency (currently a part of the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology), launched the Special Postdoctoral Researcher (SPDR) Program in fiscal 1989. In fiscal 1997, the program was expanded to accommodate a larger number of candidates, and the program management was transferred to RIKEN. From fiscal 2016 the SPDR program has been merged with the Foreign Postdoctoral Researcher (FPR) program, launched in fiscal 2007 to provide young foreign researchers with similar opportunities, to form a new SPDR program to support excellent young researchers from Japan and overseas.

## Program Features

The SPDR program offers young researchers with creative and innovative ideas an environment in which they can pursue independent research and prepare themselves to play a major role in advancing basic science. Fields covered include mathematical sciences, physics, chemistry, biology, medicine, engineering, and any other fields related to research now being conducted at RIKEN.

SPDRs must have a PhD at the time of application, and must be able to independently pursue research themes decided on the basis of what they want to pursue and how that fits in with the research being conducted at RIKEN.

Candidates are recruited every year through open application, and selection is made by a committee comprised of outside experts as well as RIKEN scientists. Selection is based on submitted documents and interviews. From 2018 the SPDR contract has become a multiple-year contract valid for three (3) years in order to provide an environment with greater stability for the researchers so they are able to focus on carrying out their research.

Host laboratories must provide the SPDRs with an environment conducive to independent research, sufficient research space, and support for the use of required research facilities and equipment, as well as guidance from the laboratory head.

Since October 2008, revisions have been introduced in the program regulations to ensure a better work-life balance, such as allowing program extension when an SPDR has to take time off for childcare.

Since the program started, there have been a total of 1730 SPDRs and 153 FPRs (as of March 2020), and there are currently 140 SPDRs (as of September 2020).

September 2020

RIKEN

# 目 次

## ◆2015年度採用者

〈 符号 〉	〈 研究課題 〉	〈 研究者氏名 〉	〈 頁 〉
XV-001	高次嗅覚中枢としての視床下部の機能的役割—嗅覚入力から内分泌系・自律神経系出力への神経回路の解明—	梶山 十和子 .....	13

## ◆2016年度採用者

〈 符号 〉	〈 研究課題 〉	〈 研究者氏名 〉	〈 頁 〉
XVI-001	ミュオン水素原子の超微細構造精密分光による陽子半径の決定	神田 聡太郎 .....	17
XVI-002	脂肪酸結合タンパク質による脂肪酸動態の制御と精神疾患	島本 知英.....	18
XVI-003	Towards Understanding Dark Matter using Lattice Quantum Chromodynamics	Enrico RINALDI .....	19
XVI-004	Regulation of Mucosal IgG by the Neonatal Fc Receptor	Alexis VOGELZANG..	21
XVI-005	ヘビークォークが作り出すエキゾチックなハドロン・原子核状態	山口 康宏.....	22
XVI-006	格子QCDを用いた核力ポテンシャルの研究とその応用	権業 慎也.....	23
XVI-007	Nuclear Mass Measurement of Super-Heavy Elements by Multi-Reflection Time-of-Flight Mass Spectrometry	Marco ROSENBUSCH	24
XVI-008	Study of Strangelets, Lightning and Meteors from Space, Balloon and Ground with Next Generation, Ultra-Sensitive Detectors	Lech Wiktor PIOTROWSKI	26

## ◆2017年度採用者

〈 符号 〉	〈 研究課題 〉	〈 研究者氏名 〉	〈 頁 〉
XVII-001	Collision of Largest Structures in the Universe	Liyi GU.....	29
XVII-002	天の川銀河中心における爆発現象の発生メカニズム解明	中島 真也.....	30
XVII-003	クォーク・グルーオンの非摂動的性質から探るQCDの新たな相構造の第一原理的探求	土居 孝寛.....	31
XVII-004	Nucleosynthesis and Jets in Neutron-Star Mergers and the Explosion Mechanism of Massive Stars	Oliver JUST .....	31
XVII-005	CONFINEMENT AND DECONFINEMENT IN QCD WITH EFFECTIVE FIELD THEORIES AND HIGHER-ORDER PERTURBATIVE CALCULATIONS	Matthias BERWEIN .....	32
XVII-006	大規模ミリ波センサーアレイと高速回転変調で迫る初期宇宙 - インフレーション宇宙とダークマター	小栗 秀悟.....	34
XVII-007	Multimessenger Search for the Origin of Neutrinos	Haoning HE .....	35
XVII-008	Probing the Heavy-Flavored Hadron Structure from Lattice QCD	Kadir Utku CAN .....	36
XVII-009	化学進化から探る分子雲コアの初期条件と星/惑星系形成の新モデルの構築	大橋 聡史.....	37
XVII-010	Development of Portable Atomic Clocks with 10E-18 Uncertainty	Andrew HINTON .....	38
XVII-011	ストレンジネスとチャームで探るバリオン構造の研究	浅野 秀光.....	39

XVII-012	Single-particle Energies and Strengths Around $^{100}\text{Sn}$ and $^{132}\text{Sn}$	Frank BROWNE .....	40
XVII-013	冷却原子気体における強相関ボソン系の理論研究	堀之内 裕理 .....	41
XVII-014	スピン偏極STM発光分光法の開発及び二次元半導体における光スピン変換ダイナミックスの観測と制御	山本 駿玄.....	42
XVII-015	任意形状光格子を用いたスピンフラストレーションの局所ダイナミックスの観測	山本 隆太.....	43
XVII-016	Noninvasive Synthetic Therapy: Organic Synthesis of Therapeutic Molecules within Living Systems	Kenward VONG .....	44
XVII-017	デジタル化分子構造の回帰分析による不斉触媒の最適形状探索	山口 滋.....	45
XVII-018	がん特異的One-Carbon Metabolismを標的としたセリン代謝を阻害する天然化合物の探索と作用機序解析	永澤 生久子 .....	46
XVII-019	生体内合成化学治療：動物内における毒性分子アクロレインから薬理活性複素環化合物への変換	Ambara Rachmat PRADIPTA	47
XVII-020	皮膚表皮角質層バリア機能に関わる水分子の物性評価	白神 慧一郎 .....	48
XVII-021	糸状菌の病原性を指標にした「獲得形質の遺伝」メカニズムの解明	熊倉 直祐.....	49
XVII-022	哺乳類卵母細胞の大きな細胞質の意義	京極 博久.....	50
XVII-023	動物細胞の運命決定の変化に伴う細胞内代謝の変動の普遍的原理の解明	柳沼 秀幸.....	51
XVII-024	Engineering synthetic biology tools to aid single-cell and 'omics' techniques for studying RNA localization and local translation	Callum John Christopher PARR	52
XVII-025	一細胞顕微鏡イメージングとデジタルRNAシークエンシングの融合による細胞分裂と分化の関連機構の解明	小川 泰策.....	53
XVII-026	単一細胞DNA複製タイミング解析によるマウス胚発生初期の三次元ゲノム構造の推定	高橋 沙央里 .....	54
XVII-027	近交系マウスの表現型および遺伝子型解析を用いた能動的低代謝メカニズムの解明	砂川 玄志郎 .....	55
XVII-028	新規スフィンゴ脂質の代謝機構および精神疾患メカニズムとの関連解明	江崎 加代子 .....	56
XVII-029	Endogenization and excision of human herpesvirus 6 in human genomes	Xiaoxi LIU .....	57
XVII-030	仮想空間を用いたゼブラフィッシュ成魚終脳における意思決定機構の解明	鳥越 万紀夫 .....	58
XVII-031	Reversing the Chromatin Defects in An Adult Circuit to Rescue An Autism Syndrome Model in <i>Drosophila</i> .	Yun Jin PAI .....	59
XVII-032	Neural basis of odor-taste multisensory integration in <i>Drosophila</i>	Hongping WEI .....	60
XVII-033	新規アルツハイマー病関連因子CAPONによる神経変性分子メカニズムの解明	橋本 翔子.....	61
XVII-034	Proteinaceous Nanostructures for Intracellular Sensing Fabricated By Direct Laser Writing in a Temperature-Controlled Microfluidic Device	Daniela SERIEN .....	63
XVII-035	無意識的推論の数理モデルの拡張と精神障害モデルへの応用	磯村 拓哉.....	64



XVII-036	Growth and Characterization of AlGaIn based UVA and UVB LEDs/LDs on AlN template on sapphire substrate or on AlN substrate or on nano-PSS	Muhammad Ajmal KHAN	65
XVII-037	Generation of single-cycle short-wave infrared pulses via BBO-based optical parametric amplifier	Yu-Chieh LIN	74
XVII-038	癌幹細胞と胎児期上皮幹細胞に共通する分子コンセプト提唱への挑戦	清川 寛文	75

## ◆2018年度採用者

〈 符号 〉	〈 研究課題 〉	〈 研究者氏名 〉	〈 頁 〉
XVIII-001	代数多様体の圏論的, 力学系的研究	大内 元気	79
XVIII-002	代数的サイクルと代数的K群の相対理論に関する研究	宮崎 弘安	79
XVIII-003	位相空間のトポロジーを用いた異常輸送現象の研究	早田 智也	80
XVIII-004	The N-body problem in astrophysics	David HERNANDEZ	81
XVIII-005	高分解能宇宙論的シミュレーションから探る球状星団の形成進化	平居 悠	82
XVIII-006	量子もつれによる量子重力理論、及び、熱化の機構の解明に向けた研究	野崎 雅弘	83
XVIII-007	Ia型超新星の多様性の解明と銀河団の超精密X線分光で迫る宇宙の化学進化	佐藤 寿紀	84
XVIII-008	将来の加速器実験に向けての格子QCD技術の開発	富谷 昭夫	85
XVIII-009	初期宇宙における宇宙網を舞台とした銀河進化の解明	梅畑 豪紀	86
XVIII-010	データ同化を応用した過去千年の高精度な気候復元	岡崎 淳史	87
XVIII-011	ベクトル中間子の核内質量分布の高統計測定によるハドロン質量の起源の解明	菅野 光樹	88
XVIII-012	Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy Investigation of 'Drumhead' Topological Surface States	Christopher BUTLER	89
XVIII-013	Coupled-wire construction法を応用した量子臨界相および量子磁性相の研究	古谷 峻介	90
XVIII-014	幾何学的位相を有する系の動的応答の理論的研究	関根 聡彦	92
XVIII-015	非共線的な磁気構造におけるスピントロニクス効果	横内 智行	93
XVIII-016	光誘起相転移とコヒーレントフォノン・マグノン生成のナノスケールイメージング	中村 飛鳥	94
XVIII-017	逆電気磁気光学効果の観測	豊田 新悟	95
XVIII-018	非一様磁化を持つ金属中の磁化振幅振動誘起電流の理論	紅林 大地	96
XVIII-019	Exploring On-Surface Photo-Synthesis under Ultrahigh Vacuum Conditions	Chi ZHANG	97
XVIII-020	ヘム輸送体によるヘム鉄の輸送とATP加水分解のシミュレーション	田村 康一	98
XVIII-021	チオフェン縮環ジラジカル化合物：可逆的重合挙動の解明と一重項分裂材料への展開	鈴木 直弥	99
XVIII-022	Development of Quantum Spectroscopy beyond the Classical Limit	Korenobu MATSUZAKI	100
XVIII-023	青色光受容体蛋白質におけるDNA修復機構の解明	佐藤 竜馬	101

XVIII-024	有機光電変換過程の分子論的探求	中野 恭兵.....	102
XVIII-025	Visualization of Dynamic Compaction of Nucleosome Using Photoactivable-FRET	Sooyeon KIM .....	103
XVIII-026	ラマン分光法を用いたNa <sup>+</sup> およびK <sup>+</sup> 特異的なインジケータの開発	江越 脩祐.....	104
XVIII-027	Cancer Targeted Delivery of Peptide-Assembled Carriers Equipped with Dual Aptamer Ligands	Nandakumar AVANASHIAPPAN .....	105
XVIII-028	Investigating the Role of an RNA Methyltransferase: Fibrillarin in Neural Stem Cells	Quan WU.....	106
XVIII-029	幻覚の神経メカニズムの探索	大石 康博.....	107
XVIII-030	コヒーレントX線回折イメージングによる細胞丸ごとの四次元構造解析	小林 周.....	108
XVIII-031	ディープラーニングを用いた形態形成における遺伝子制御ネットワークの推測方法の確立	鬼丸 洸.....	109
XVIII-032	テラヘルツ光を応用した生体高分子制御技術の探索	山崎 祥他.....	109
XVIII-033	モリブデン酵素群を標的としたケミカルバイオロジー研究：植物の新規生理活性物質の同定に向けて	渡邊 俊介.....	110
XVIII-034	Analysis of 3D biological shapes for the interpretation of structural biology data	Sandhya P. TIWARI.....	111
XVIII-035	酵母の種分化機構におけるフェロモンと受容体の共進化	清家 泰介.....	112
XVIII-036	細菌の実験室進化による形態移行過程における進化原理の解明	前田 智也.....	114
XVIII-037	Biomedical Transition from Lab to Clinic: a study of the conditions required to produce safe and functional biomedical grade retinal pigment epithelium (RPE) directly from somatic cells.	Cody KIME.....	115
XVIII-038	比較オミクス解析を活用したヒト脱分化脂肪細胞の生理活性物質による神経分化誘導	中野 令.....	116
XVIII-039	IL-4による新規NK細胞活性化機構とその生理的意義の解明	木庭 乾.....	118
XVIII-040	Development of Ultra-high Efficiency AlGaN Deep-UV Emitters using Nano-photonic Light Extraction Scheme	Joosun YUN.....	118
XVIII-041	Development of Time Resolved STM-THz-TDS System for Studying the Ultrafast Carrier Dynamics of Graphene Name: Rafael JACULBIA (in upper case)	Rafael JACULBIA .....	120
XVIII-042	抗癌活性を持つ新規スマート高分子ミセルの開発：トリプルシナージ効果による癌治療への挑戦	金 栄鎮.....	121
XVIII-043	ナノカーボン材料によるテラヘルツ帯機能性デバイスの開発	鈴木 大地.....	122
XVIII-044	非標準型光格子による平坦バンド中のボース気体の振舞いの解明	小沢 秀樹.....	123
XVIII-045	抑制性クロマチン修飾H3K9me3の維持機構とH3K9me3による転写抑制機構の解明	福田 溪.....	124
XVIII-046	DNA ペイント法を用いたRNA ポリメラーゼとエンハンサーアセンブリの超解像イメージングと1分子キネティクス解析	藤田 恵介.....	125
XVIII-047	Investigation of structural and dynamical properties of C60 in ion storage rings RICE and TMU-E upon photon impact	Preeti Manjari MISHRA	126
XVIII-048	軌道縮退系における過冷却電子相の開拓と制御	松浦 慧介.....	127

XVIII-049	Star Formation across Mass Spectrum and Environments	Yichen ZHANG .....	128
XVIII-050	ニューラルネットワークが持つ決定論的特性が果たす計算論的役割の 解明	寺田 裕.....	129

### ◆2019年度採用者

〈 符号 〉	〈 研究課題 〉	〈 研究者氏名 〉	〈 頁 〉
XIV-001	正標数の代数多様体の有界性	佐藤 謙太.....	133
XIV-002	アクティブマターとしての細胞の運動と力学制御	多羅間 充輔 .....	134
XIV-003	族のゲージ理論の展開と応用	今野 北斗.....	135
XIV-004	AdS/CFTで探る量子重力理論の構造と時空生成のメカニズム	後藤 郁夏人 .....	136
XIV-005	超精密原子核時計の実現に向けたTh-229mの原子核構造および原子 核壊変機構の解明	重河 優大.....	137
XIV-006	曲がった時空のカイラル運動論の定式化および渦度が誘発するトポロ ジカルな現象への応用	豆田 和也.....	138
XIV-007	重元素精密分光のための冷却フランシウム原子源の研究	早水 友洋.....	139
XIV-008	複素Langevin法の一般化による符号問題の回避手法に関する研究	筒井 翔一郎 .....	140
XIV-009	セシムスパッター型負イオン源における分子イオン生成プロセスの研 究	三宅 泰斗.....	141
XIV-010	原子核スピン分布制御という新奇手法を用いた中性子過剰原子核の構 造解明	西畑 洸希.....	142
XIV-011	三次元コヒーレント共鳴励起を用いたLi様ウランイオンのラムシフ ト分光	上野 恭裕.....	142
XIV-012	輻射多流体シミュレーションを用いた星・円盤・惑星系形成の研究	仲谷 峻平.....	143
XIV-013	強いスピン軌道相互作用を持つ1次元電子系の物性解明と超伝導接合 への展開	松尾 貞茂.....	145
XIV-014	汎用的な四粒子系非断熱多分岐反応計算法の開発と低温反水素原子反 応への応用	山下 琢磨.....	147
XIV-015	Nanosopic Visualization of Non-equilibrium Electron Kinetics via Terahertz Fluctuation in Matters	Qianchun WENG.....	148
XIV-016	Research topic (capitalize) New Phases and Pheneomena from Frustration	John Owen BENTON ..	149
XIV-017	超伝導回路上で実現する開放量子系の制御と測定	河野 信吾.....	150
XIV-018	クロマチン構造転移の生物物理：細胞分化現象のミクロ理解に向けて	深井 洋佑.....	151
XIV-019	Rare-Earth-Catalyzed Regio- and Enantioselective C-H Bond Functionalization	Xuefeng CONG.....	152
XIV-020	In-situ 分光電気化学情報の統計処理による多電子移動反応論の開拓	大岡 英史.....	153
XIV-021	Exploring New Possibilities of Phthalocyanines through Supramolecular Approaches	Cheng ZHANG .....	154
XIV-022	Three-Dimensional Organic Semiconductors: A Non-Fullerene Approach	Mitisidike RUKEYAMU	155
XIV-023	静電反発力制御を基軸とする、無機ナノシートからなる3次元・4次元 構造体の構築：光学・力学・輸送における革新的機能創成を目指して	佐野 航季.....	156

XIV-024	迅速誘導合成による植物ホルモンの作用機構解明分子ツールの開発	齋藤 雄太朗 .....	157
XIV-025	DNA複製蛍光可視化システムの開発とこれを用いたHi-Cコンパートメント制御因子の網羅的探索	大字 亜沙美 .....	158
XIV-026	神経細胞の樹状突起におけるタンパク質の局所分解	持田 啓佑 .....	159
XIV-027	高速超解像顕微鏡法の開発とこれを用いた生細胞内での1分子から細胞規模に跨る確率過程の直接観察	宮代 大輔.....	159
XIV-028	組織・形態形成の数理的理解に向けた機械学習法の開発	松本 拓高.....	160
XIV-029	“光るRNA”によって明らかにする、RNAのかたちを介した遺伝子発現制御ネットワークとその機能	有吉 哲郎.....	161
XIV-030	植物種皮より分泌されるペプチドホルモンの同定及び種子圏における機能解明	ツァイ イールン .....	162
XIV-031	ゲノム倍数性がもたらす進化可能性～安定性と進化の両立	大林 龍胆.....	163
XIV-032	ゼブラフィッシュの予測コーディングによる意思決定機構の解明	谷本 悠生.....	164
XIV-033	Global and Quantitative Analysis of Neuronal RNA Granules	Marek KRZYZANOWSKI	164
XIV-034	Modulation of the Strength of Emotional Memories by High States of Anxiety	Nur Zeynep GUNGOR	165
XIV-035	Research topic Investigation of manipulation of interneuron activity on hippocampal memory formation	Vladislav SEKULIC.....	166
XIV-036	ヒト型モデルマウス家系における自閉症リスク遺伝子の多重ヒット仮説	仲西 萌絵.....	167
XIV-037	レプチンシグナルによる性成熟開始の神経回路基盤	後藤 哲平.....	168
XIV-038	Molecular Changes in Sensory Neurons During Chronic Cutaneous Inflammation	Sotaro OCHIAI .....	169
XIV-039	mTORC1シグナルの細胞間不均一性を生み出す仕組みとその役割の1細胞光シームレス解析	小松 直貴.....	170
XIV-040	Ultrasensitive SERS microfluidic chips fabricated by photonic methods	Shi BAI.....	171
XIV-041	Microfluidic Assisted Synthesis of RNAi-based Cancer Nanomedicine	Hei Man LEUNG.....	172
XIV-042	Characterization of Dry-Cured Sausages Stuffed in A New Innovative Casing Formulation Based on Terahertz Spectroscopy and Imaging	Chao-Hui FENG .....	173
XIV-043	真空の非線形光学の探索へ向けたX線自由電子レーザー極限集光技術の確立	山田 純平.....	174
XIV-044	スーパーキラル光を用いたキラル光クロマトグラフィーの開発	橋谷田 俊.....	175
XIV-045	Tip-Enhanced Raman Spectroscopy of Homogeneous Displacement of Aromatic Thiolates for Binary Self-Assembled Monolayers on Au(111)	Misun HONG .....	177
XIV-046	Development of a Hybrid Scanning Probe-Fluidic Nanospectroscopy System for In-Situ Molecular Bioanalysis	Maria Vanessa BALOIS	178
XIV-047	非侵襲脳刺激により解明する脳波同期の機能的役割	小野島 隆之 .....	179
XIV-048	室温で電子スピン操作可能なカーボンナノチューブ単一量子源の実現	小澤 大知.....	180
XIV-049	恐竜のボディプラン成立の進化的メカニズムについて	江川 史朗.....	181

基礎科学特別研究員  
2015年度採用者



高次嗅覚中枢としての視床下部の機能的役割  
—嗅覚入力から内分泌系・自律神経系出力への神経回路の解明—  
Functional analysis of hypothalamus as a higher olfactory center  
—From olfactory input to endocrine and autonomic output—

研究者氏名: 梶山 十和子 Kajiyama, Towako  
受入研究室: 脳神経科学研究センター  
シナプス分子機構研究チーム  
(所属長 吉原 良浩)

生物は生存のため、常に外界の情報をもとに体内の状態を調節している。中でも嗅覚系は外界からの情報入力経路として多くの生物種に利用されている。また、体内の状態は内分泌系および自律神経系により調節されている。内分泌系・自律神経系は視床下部にその中枢をもつ。しかし、視床下部のニューロンへの嗅覚情報の入力経路、そして内分泌系・自律神経系への出力経路は全く明らかになっていない。本研究はゼブラフィッシュをモデルとして、嗅覚の入力から視床下部を経て、内分泌系・自律神経系の出力に至るまでの神経伝達の経路を包括的に明らかにすることを目的とした。

本年度は、以下の3点に取り組んだ。

(1) 視床下部における神経ペプチド・モノアミン類発現分布アトラスの作製

ゼブラフィッシュ視床下部において嗅覚情報の入力を受けるニューロン群の性質を調べ、マーカー遺伝子を探索するために、神経ペプチドの発現アトラスを作製した。本年度は、アトラスを論文としてまとめ、投稿するために必要な追加実験を行うための

サンプル準備を行った

(2) 性フェロモン刺激により活性化される脳領域の特定および生体内の変化の定量

本年度は、嗅覚刺激の中で性フェロモンに着目して研究を行った。ゼブラフィッシュの性フェロモン受容体と考えられている遺伝子2つのダブルノックアウトフィッシュにおいて、表現型解析を行うために、実験に使用する魚の準備と、実験系の検討を行った。また、これらの受容体の性フェロモンへの応答性を培養細胞実験により解析した。

(3) 視床下部におけるカルシウムイメージング

視床下部が嗅覚刺激にどのように応答するのかをリアルタイムに調べるために、視床下部におけるカルシウムイメージングに取り組んだ。本年度は、視床下部においてカルシウムインジケーター(GCaMP)を発現するトランスジェニック系統の探索を行った。視床下部にGal4を発現するトランスジェニックフィッシュと、UAS:GCaMPの系統との交配を進め、カルシウムイメージング実験の準備を行った。





基礎科学特別研究員  
2016年度採用者



Precision Spectroscopy of the Hyperfine Splitting in Muonic Hydrogen Atom  
for the Determination of the Proton Radius

研究者氏名: 神田 聡太郎 Sohtaro Kanda

受入研究室: 開拓研究本部

岩崎中間子科学研究室

(所属長 岩崎 雅彦)

本研究課題では、ミュオンと陽子との束縛状態であるミュオン水素原子の基底状態における超微細構造をレーザー分光して陽子のZemach半径を実験的に決定することを目標としている。これまでに、2017年度は遷移を誘起するためのレーザー光源の開発を、2018年度はミュオン重水素原子を用いて超微細遷移に伴うミュオンスピン反転信号検出の原理実証を行った。2019年度は、ミュオン水素原子を低圧の水素ガス中で生成し、縦磁場中でのミュオンスピン回転測定によって基底状態におけるミュオンスピン偏極率、およびミュオン水素原子が標的中の陽子とスピン交換衝突することによって減偏極する過程の断面積を求めた。ミュオンスピン回転法によるミュオン水素原子のスピン回転観測は世界初であり、モンテカルロ・シミュレーションを併用した詳細なデータ解析を進めている。解析結果がまとまり次第、論文として投稿される予定である。

また、これまで計画・準備を進めてきた気体水素標的に加えて、拡散による真空放出を利用した固体水素標的を新たに着想し、検討・開発を行った。分光実験の測定精度は、レーザー光による遷移確率と励起状態の寿命およびミュオン水素原子の生成数によって決まる。気体標的による実験では原子生成数が大きい一方でスピン交換衝突によって励起状態の寿命が短くなる。一方、固体水素から真空中に放出されたミュオン水素原子を用いた飛行中分光では、原子生成数が少ないながらもスピン交換衝突による脱励起が起きないために信号/雑音比が高い。前述のミュオンスピン回転測定によって求めた励起状態の寿命を用いてふたつの標的を比較し、いずれの標的でも実験可能ではあるものの、固体水素標的がより有力な解となりうることを見出した。固体水素を標的として用いるアイデアは奨励課題に採択され、冷却した金属薄膜上に固体水素を形成して標的とするシステムの大部分を完成させることができた。

●誌上発表 Publications

1. S. Kanda et al., “Negative muon spin rotation with low-density gas target under transverse magnetic field to solve the proton radius puzzle”, RIKEN APR Vol. 52 (2019) 180.
2. Y. Ueno, et al., “New Precise Measurement of Muonium Hyperfine Structure”, Proceedings of Science, PoS(ICHEP2018)466. (2019).
3. A. Adare et al. “Multiparticle azimuthal correlations for extracting event-by-event elliptic and triangular flow in Au + Au collisions at  $\sqrt{s_{NN}} = 200$  GeV”, Phys. Rev. C 99, 024903 (2019).
4. M. Abe et al., “A new approach for measuring the muon anomalous magnetic moment and electric dipole moment”, PTEP 5, 053C02 (2019).
5. PHENIX Collaboration, “PHENIX Collaboration”, Nuclear Physics A 982, 1053 (2019).

●口頭発表 Oral Presentations

1. 大強度パルスミュオンビームを用いた精密測定実験のための測定器開発、測定器開発プラットフォーム研究会、東京、2019年12月。
2. Precision microwave spectroscopy of the ground-state hyperfine splitting in muonium atom, S型課題合同研究会、名古屋、2019年12月。
3. Negative muon spin rotation with low-density gas target under transverse magnetic field to solve the proton radius puzzle, MRM2019, Yokohama, Dec. 2019.
4. Measurement of the proton Zemach radius from the hyperfine splitting in muonic hydrogen utilizing muon spin repolarization with laser, Proton Radius 2019, Croatia, Sep. 2019.
5. ミュオン崩壊における時間反転対称性の破れを探索する新たな実験の提案、日本物理学会秋季大会、山形、2019年9月。

6. A search for Majoranality of neutrinos in muon decay using a positron polarimeter, NuFACT2019, Korea, Aug. 2019.
7. Laser spectroscopy of the hyperfine splitting in muonic hydrogen by a measurement of decay electron asymmetry, FAMU Collaboration Meeting, Italy, July 2019.
8. ミューオン水素原子のレーザー分光による陽子 Zemach 半径の測定, ExpRes 春合宿, 静岡, 2019 年 5 月.
9. ミューオン水素原子のレーザー分光に向けたスピン回転実験, 第 74 回日本物理学会年次大会, 福岡, 2019 年 3 月.

10. Development of instruments for the proton radius measurement at RIKEN, International workshop on the structure of the proton, Yamagata, Feb. 2019.

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

1. Laser spectroscopy of the hyperfine splitting in muonic hydrogen atom, Okinawa, Mar 2019.
2. A search for Parity Violation in Muonic Atoms using a Segmented Calorimeter, NuFACT2019, Korea, Aug. 2019.
3. ミューオン原子の分光によるパリティ非保存過程の観測と新物理探索, 原子衝突学会年会, 東京, 2019 年 9 月.

XVI-002

### 脂肪酸結合タンパク質による脂肪酸動態の制御と精神疾患

#### Regulation of Lipid Homeostasis by Brain-type Fatty Acid Binding Protein in Psychiatric Disorders

研究者氏名: 島本知英 SHIMAMOTO, Chie  
 受入研究室: 脳神経科学研究センター  
 分子精神遺伝研究チーム  
 (所属長 吉川 武男)

代表的な精神疾患である統合失調症の病態メカニズムは未だ不明であるが、多くの臨床研究によりその病態と関連がある分子の一つとして脂質（特に脂肪酸）が注目されている。また、我々のこれまでの研究から、脂肪酸シャペロン分子の一つである「脳型脂肪酸結合タンパク質 (FABP7)」も統合失調症の病態に関与している可能性が高い分子であるとわかっている。そこで本研究では、まず統合失調症モデルマウス (*Fabp7* ノックアウトマウス) を用いたイメージング質量分析を行い、脳のどの領域でどのような脂質が変化しているのかを探索し、次にその結果からヒントを経てヒトサンプルを用いた解析へと展開していった。このように階層的に研究を展開していくことは、疾患の分子病理の解明、新しい治療法の創製、提案につながるものと期待する。

昨年度までの研究で、統合失調症患者の死後脳(白質領域)では、特定の脂肪酸側鎖をもつリン脂質が有意に低下していることが判明した。この脂質の変動は FABP7 の変化だけでは説明できないことから、次に脂質合成代謝に関わるタンパク質をコードする遺伝子にも視野を広げて拡大サンプル(死後脳脳

梁部位: コントロール 92 例、統合失調症患者 95 例)を用いた遺伝子発現解析をおこなったところ、統合失調症患者群で変動している 10 種類の脂質合成代謝関連遺伝子を同定した。さらに、これらの遺伝子の上流に位置すると予測された 7 種類の転写因子が統合失調症患者サンプルで変動していることも見出した。

本年度はこれまでに得た遺伝子発現解析のデータをもとに、Ingenuity Pathway Analysis (IPA) ソフトウェアを用いたパスウェイ解析などの *in silico* 解析を行い、統合失調症の病態に関与する可能性の高い分子ネットワークを同定した。また、その分子ネットワークのハブとして働く可能性が高い分子の同定にも成功した。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

1. Motoko Maekawa, Tetsuo Ohnishi, Shabeesh Balan, Yasuko Hisano, Yayoi Nozaki, Hisako Ohba, Manabu Toyoshima, Chie Shimamoto, Chinatsu Tabata, Yuina Wada, Takeo Yoshikawa: "Thiosulfate pro-

- motes hair growth in mouse model.”, *Biosci Biotechnol Biochem.*, Biosci Biotechnol Biochem., 83(1); 114-122, 2019
2. Chie Shimamoto-Mitsuyama, Tetsuo Ohnishi, Shabeesh Balan, Hisako Ohba, Akiko Watanabe, Motoko Maekawa, Yasuko Hisano, Yoshimi Iwayama, Yuji Owada, Takeo Yoshikawa: “Evaluation of the role of fatty acid-binding protein 7 in controlling schizophrenia-relevant phenotypes using newly established knockout mice.”, *Schizophrenia Research*, doi: 10.1016/j.schres.2019.02.002 (Epub ahead of print), 2019
  3. Tetsuo Ohnishi, Shabeesh Balan, Manabu Toyoshima, Motoko Maekawa, Hisako Ohba, Akiko Watanabe, Yoshimi Iwayama, Yuko Fujita, Yunfei Tan, Yasuko Hisano, Chie Shimamoto-Mitsuyama, Yayoi Nozaki, Kayoko Esaki, Atsuko Nagaoka, Junya Matsumoto, Mizuki Hino, Nobuko Mataga, Akiko Hayashi-Takage, Kenji Hashimoto, Yasuto Kuniid, Akiyoshi Kakita, Hirooki Yabe, Takeo Yoshikawa: “Investigation of betaine as a novel psychotherapeutic for schizophrenia.”, *EBioMedicine* 45; 432-446, 2019 (査読有)
  4. Masayuki Ide, Tetsuo Ohnishi, Manabu Toyoshima,

Shabeesh Balan, Motoko Maekawa, Chie Shimamoto-Mitsuyama, Yoshimi Iwayama, Hisako Ohba, Akiko Watanabe, Takashi Ishii, Norihiro Shibuya, Yuka Kimura, Yasuko Hisano, Yui Murata, Tomonori Hara, Momo Morikawa, Kenji Hashimoto, Yayoi Nozaki, Tomoko Toyota, Yuina Wada, Yosuke Tanaka, Tadafumi Kato, Akinori Nishi, Shigeyoshi Fujisawa, Hideyuki Okano, Masanari Itokawa, Nobutaka Hirokawa, Yasuto Kunii, Akiyoshi Kakita, Hirooki Yabe, Kazuya Iwamoto, Kohji Meno, Takuya Katagiri, Brian Dean, Kazuhiko Uchida, Hideo Kimura, Takeo Yoshikawa: “Excess hydrogen sulfide and polysulfides production underlies a schizophrenia pathophysiology.”, *EMBO Molecular Medicine*, 11(12); e10695, 2019

#### ●口頭発表 Oral Presentations

Chie Shimamoto-Mitsuyama, Kayoko Esaki, Tetsuo Ohnishi, Motoko Maekawa, Yoshimi Iwayama, Shabeesh Balan, Brian Dean and Takeo Yoshikawa: “Altered lipid metabolism of the corpus callosum of patients with schizophrenia”, 6th Congress of AsCNP, Fukuoka, October, 2019

XVI-003

### Towards Understanding Dark Matter using Lattice QCD Techniques

Name: Enrico RINALDI

Host Laboratory: Quantum Hadron Physics Laboratory

RIKEN Nishina Center for Accelerator-Based Science

Laboratory Head: Tetsuo HATSUDA

The Large Hadron Collider (LHC) and the biggest underground detectors for dark matter searches have come up empty handed in their recent searches for this elusive form of matter that makes up approximately 85% of all mass in our Universe. Both colliders and underground detectors have been only able to place new limits on the mass and interactions of dark matter, under the assumption that dark matter is a particle behaving according to some commonly used models.

Another avenue for discovering dark matter and new physics beyond the Standard Model (BSM) is with pre-

cision low- energy nuclear experiments, such as the neutron lifetime, neutron-anti-neutron oscillations or neutrinoless double-beta decay. Precise measurements of these nuclear observables can be compared to theoretical predictions coming from non-perturbative lattice QCD calculations in the Standard Model in order to understand possible deviations hinting towards BSM effects.

This year I have published a pair of papers, one PRL and a corresponding PRD with more details, with colleagues from Lawrence Livermore National Laborato-

ry that calculates for the first time the largest QCD matrix elements that govern the transition of a neutron to its own antiparticle, a process that violates baryon number and can be used in theories of baryogenesis to explain why our universe is dominated by matter instead of antimatter. Our results are relevant to the experimental community searching for this process in detectors. These papers were submitted during the previous fiscal year.

The importance of new physics beyond the Standard Model and in particular new strong dynamics, was the focus of a dedicated White Paper that I wrote with colleagues from universities and National Laboratories in the USA. Lattice quantum field theory techniques that I applied successfully in my SPDR research were highlighted in the paper and submitted to the European Physics Journal for publication.

Moreover, with colleagues from the UK and Germany, I have submitted a paper to the Journal of High Energy Physics studying the confinement/deconfinement transition in a simple matrix model to highlight a novel phase which might be relevant to describe black holes in quantum gravity using microscopical gauge degrees of freedom.

## ●Publications

### Papers

Enrico Rinaldi, Georg Bergner, Norbert Bodendorfer, Masanori Hanada, Andreas Schafer, Pavlos Vranas: Thermal phase transitions in Yang-Mills matrix model. *arxiv:1909.04592, submitted to JHEP\**

Enrico Rinaldi, Richard Brower, Anna Hasenfratz, Ethan Neil, Simon Catterall, George Fleming, Joel Giedt, David Schaich, Evan Weinberg, Oliver Witzel: Lattice gauge theory for physics beyond the Standard Model. *arxiv:1904.09964 submitted to EPJ\**

Enrico Rinaldi, Henry Monge-Camacho, Evan Berkowitz, David Brantley, Andre Walker-Loud, Chia Cheng Chang, Arjun Gambhir, Nicolas Garron, M. A. Clark, Thorsten Kurth, Balint Joo, Amy Nich-

olson, Brian Tiburzi, Pavlos Vranas: Short range operator contributions to OnuBB decay from LQCD. *arxiv:1904.12055, published as proceeding\**

Enrico Rinaldi, Evan Berkowitz, David Brantley, Ken McElvain, Andre Walker-Loud, Chia Cheng Chang, M. A. Clark, Thorsten Kurth, Balint Joo, Henry Monge-Camacho, Amy Nicholson, Pavlos Vranas: Progress in Multibaryon Spectroscopy. *arxiv:1902.09416, submitted FY18 and now published as proceeding*

Enrico Rinaldi, Sergey Syritsyn, Michael L. Wagman, Michael I. Buchoff, Chris Schroeder, Joseph Wasem: Lattice QCD determination of neutron-antineutron matrix elements with physical quark masses. *arxiv:1901.07519, submitted FY18 and now published\**

Enrico Rinaldi, Sergey Syritsyn, Michael L. Wagman, Michael I. Buchoff, Chris Schroeder, Joseph Wasem: Neutron- antineutron oscillations from lattice QCD. *arxiv:1809.00246, submitted FY18 and now published\**

## ●Oral Presentations

### Conferences

Rinaldi E.: Signals of composite dark matter. “Strong dynamics for physics within and beyond the Standard Model at LHC and future colliders” at ECT\*, Trento, Italy, September (2019)

Rinaldi E.: Towards a non-perturbative study of quantum gravity corrections. “Quantum and Gravity in Okinawa” at OIST, Okinawa, Japan, July (2019)

Rinaldi E.: Nuclear matrix elements for baryogenesis. “Frontiers in Lattice QCD” at YITP, Kyoto, Japan, April (2019)

ascale computing. RIKEN Nishina Center, Wako, Japan, July (2019)

Rinaldi E.: The data science of physics. Arithmer Inc., Tokyo, Japan, June (2019)

Rinaldi E.: Composite Dark Matter. RIKEN Nishina Center, Wako, Japan, May (20)

Rinaldi NL Research Center, BNL, Upton, NY, March (2019)

Name: Alexis VOGELZANG

Host Laboratory: Laboratory for Mucosal Immunity

RIKEN Center for Integrative Medical Sciences

Laboratory Head: Sidonia FAGARASAN

Local immune cells are essential for the homeostasis of intestinal epithelial cells, yet persistent immune inflammation can have many damaging local effects. We performed comparative transcriptional profiling of colonic epithelial cells under homeostatic conditions in comparison to immune-deficient mice (*rag1*<sup>-/-</sup>) or animals displaying chronic inflammation to bacterial antigens (*rorgt*<sup>-/-</sup>). We identified dysregulation of epithelial glycosylation pathways in the inflamed colon. Matched glycan analysis of the IgA found in the gut of WT and *rorgt*<sup>-/-</sup> shows that this too differs between intestinal homeostasis and disease, particularly the nature of the outer-most residues. It remains unclear whether this is due to the inflamed status of the epithelium or the altered bacterial populations. In order to examine IgA glycans in the absence of the confounding presence of bacteria, we have developed an organoid co-culture system to isolate IgA glycan modifications added by plasma cells and epithelial cells during homeostasis and inflammation. This work will continue in the laboratory of Sidonia Fagarasan in mouse models of immunity and the germ-free system, while I have submitted a Marie Skłodowska Curie fellowship application to build on these studies with human inflammatory bowel disease patient samples in the lab of Dr Ahmed Hegazy at the Charite hospital in Berlin, Germany in 2020.

During my SPDR, my analysis of the metabolomics profiles of either resting or activated immune cells has led us to a new understanding of how immune cells may collaborate by differential metabolite production during inflammation. This is relevant in the epithelium where both plasma cells secreting IgA and CD8 T cells are present in the intestines in high numbers in both health and disease. Our metabolic profiling of IgA plasma cells has shown that they uptake upstream metabolites such as amino acids, and secrete metabolites that can influence the behavior of nearby effector CD8 cells

through multiple pathways. In collaboration with Dr. Baihao Zhang I investigated these interactions using *in vitro* metabolite tracing experiments with cultured CD8 T cells, using a tumor model system to discover the relevance of these interactions to effector T cell activity *in vivo*. We have now completed an additional analysis of peripheral plasma metabolites derived from human cancer patients before and after treatment with Nivolumab immunotherapy in collaboration with Kyoto University researchers to supplement our preliminary mouse studies. These studies are currently being prepared for publication in 2019 or early 2020. I will continue to work on these collaborations as an external research consultant for Sidonia Fagarasan and her Mucosal Immunity laboratory.

#### ● Publications

1. Suzuki K, Vogelzang A, Fagarasan S: MZB1 folding and unfolding the role of IgA. PNAS 2019, 116(27):13163-13165.
2. Vogelzang A, Guerrini MM, Minato N, Fagarasan S: Microbiota - an amplifier of autoimmunity. Curr Opin Immunol 2018, 55:15-21
3. Nakajima A, Vogelzang A, Maruya M, Miyajima M, Murata M, Son A, Kuwahara T, Tsuruyama T, Yamada S, Matsuura M, et al.: IgA regulates the composition and metabolic function of gut microbiota by promoting symbiosis between bacteria. J Exp Med 2018, 215:2019-2034.
4. Guerrini MM, Vogelzang A, Fagarasan S: A Hen in the Wolf Den: A Pathobiont Tale. Immunity 2018, 48:628-631
5. Reece ST, Vogelzang A, Tornack J, Bauer W, Zedler U, Schommer-Leitner S, Stingl G, Melchers F, Kaufmann SHE: Mycobacterium Tuberculosis-Infected Hematopoietic Stem and Progenitor Cells Unable to Express Inducible Nitric Oxide Synthase Propagate Tuberculosis in Mice. J Infect Dis 2018,

- 217:1667-1671.
6. Beigier-Bompadre M, Montagna GN, Kuhl AA, Lozza L, Weiner J, 3rd, Kupz A, Vogelzang A, Mollenkopf HJ, Lowe D, Bandermann S, et al.: Mycobacterium tuberculosis infection modulates adipose tissue biology. PLoS Pathog 2017, 13:e1006676.
7. Jandl C, Liu SM, Canete PF, Warren J, Hughes WE, Vogelzang A et al. IL-21 restricts T follicular regulatory T cell proliferation through Bcl-6 mediated inhibition of responsiveness to Il-2. Nat. Comm. 2017, 8:14647.
8. Tornack J, Reece ST, Bauer WM, Vogelzang A et al.

- Human and Mouse Hematopoietic Stem Cells are a Depot for Dormant Mycobacterium tuberculosis. PLoS One 2017 12(1):e0169119.
9. Perdomo C, ... Vogelzang A, Kaufmann SH and Kupz A. Mucosal BCG Vaccination Induces Protective Lung-Resident Memory T Cell Populations against Tuberculosis. MBio 7(6). Pii: e01686-16.

#### ●Presentations

SPDR poster presentation RIKEN WAKO campus January 28, 2019.

## XVI-005      ヘビークォークが作り出すエキゾチックなハドロン・原子核状態 Heavy Quark and Exotic Hadron-Nuclear States

研究者氏名: 山口康宏 Yamaguchi, Yasuhiro  
受入研究室: 仁科加速器科学研究センター  
ストレンジネス核物理研究室  
(所属長 肥山 詠美子)

近年、標準的なハドロン描像 (3クォークからなるバリオン、クォーク-反クォークからなるメソン) では説明できない、エキゾチックな構造を持ったハドロン (エキゾチックハドロン) が加速器実験研究により報告されている。それらの構造や働く相互作用について盛んに研究が行われているが、特にハドロン閾値近傍では、ハドロン複合状態である「ハドロン分子」の出現が議論されている。本研究では2015年にLHCbより報告され、2019年に新たな解析が出されたペンタクォーク状態Pcに着目し、その構造研究を行った。ヘビーマソンD(\*)とヘビーバリオン $\Sigma c^*$ からなるハドロン分子としての2体問題を解く。相互作用として、長距離力であるone pion exchange potential (OPEP)、近距離力として、コンパクト5クォーク状態との結合を導入した。

本年度は、2019年にLHCbより報告された新たなPc状態の解析をもとに、本研究の模型による解析が行われた。そこで、

(1) 実験データに合うようにパラメータを固定し、ハドロン分子の束縛・共鳴状態の理論解析を行った。模型のパラメータは一つだけでも関わらず、調整することで実験で報告された3つの状態の質量と崩壊幅を説明することができた。さらに、実験で

はまだ報告されていない新たな状態があることを予言した。

(2) 本解析により、実験で報告されたPc状態の量子数 (全スピンとパリティ) を決定した。そこで、OPEPのテンソル力が重要な働きをしていることが得られた。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Yamaguchi Y., Hosaka A., Takeuchi S. and Takizawa M.: “Heavy hadronic molecules with pion exchange and quark core couplings: a guide for practitioners”, arXiv:1908.08790 [hep-ph] 1-72 (2019)

Yamaguchi Y., Garcia-Tecocoatzi H., Giachino A., Hosaka A., Santopinto E., Takeuchi S. and Takizawa M.: “Heavy quark spin symmetry with chiral tensor dynamics in the light of the recent LHCb pentaquarks”, arXiv:1907.04684 [hep-ph] pp.1-14 (2019)

Shimizu Y., Yamaguchi Y., Harada M., “Heavy quark spin multiplet structure of Pc(4312), Pc(4440), and Pc(4457)”, arXiv:1904.00587 [hep-ph] pp.1-4 (2019)



Shimizu Y., Yamaguchi Y., Harada M., “Heavy quark spin multiplet structure of Pc-like pentaquark as P-wave hadronic molecular state”, Prog. Theor. Exp. Phys. 2019, 123D01 pp.1-25 (2019)\*

#### ●口頭発表 Oral Publications

山口康宏: “電子の電気双極子モーメントにおけるハドロンループの寄与”, Flavor Physics Workshop 2019, 大阪 2019年11月

山口康宏: “2メソン系におけるヘビーフレーバー交換相互作用”, 日本物理学会2019年秋季大会, 山形大学, 山形, 2019年9月

Yamaguchi Y.: “Hadronic molecules of heavy hadrons with tensor force”, The 24th European conference on

few-body problems in physics, University of Surrey, Guirford, UK Sep. (2019)

Yamaguchi Y.: “Workshop on Chiral and heavy quark symmetries in quark-hadron physics”, Osaka University, Osaka, Japan Aug. (2019)

Yamaguchi Y.: “Role of the tensor force in the heavy hadronic molecules”, The 18th International Conference on Hadron Spectroscopy and Structure (HADRON2019), Guilin, China Aug. (2019)

山口康宏: “パイオン交換力とハドロン分子状態”, 研究会「クォーク模型からみたエキゾチックハドロン研究の進展とQCDの新展開」, 理化学研究所, 埼玉 2019年7月

## XVI-006

### 格子QCDを用いた核力ポテンシャルの研究とその応用

#### Baryon-Baryon interaction from Lattice QCD and its application

研究者氏名: 権業 慎也 Shinya Gongyo  
受入研究室: 仁科加速器科学研究センター  
量子ハドロン物理学研究室  
(所属長 初田 哲男)

二つのバリオン（クォーク6個）からなる安定な粒子（ダイバリオン）は、1930年代に発見された重陽子（陽子1個と中性子1個の束縛状態）を除いて観測されていない。昨年度我々は格子QCDを用いて、スーパーコンピューター京ならびにFX100にて現実に非常に近い状況下（パイ中間子の質量が140MeV程度）での $\Omega\Omega$ 間相互作用を導出した。さらにこの相互作用を用いてシュレディンガー方程式を解くことで、 $\Omega$ 粒子同士が弱く束縛するダイバリオン「ダイオメガ ( $\Omega\Omega$ )」が存在する結果が得られた。ダイオメガが実験で観測されると、世界で二例目の約一世紀ぶりの新しいダイバリオンの発見となる。

そのために今年度、我々はこのダイバリオンを捉える可能性が高い実験、重イオン衝突実験で観測される2バリオン相関関数の振る舞いを調べた。我々が格子QCDで計算した $\Omega\Omega$ 間相互作用を用いて、小さい系での相関関数と大きい系での相関関数の比を求めた。この比はクーロン力の影響を減らすことができるため、格子QCDの結果と実験結果とを比較する上で有用である。その結果、 $\Omega\Omega$ 間の相対運

動量が小さい領域では、その比は相互作用がない時と比べて非常に大きな値を示すことがわかった。このような振る舞いは、今後、スイス・ジュネーブにある大型ハドロン衝突型加速器LHCでの次の稼働（RUN3）で観測されることが期待される。この研究内容は、Physical Review CのEditor's suggestionに選ばれた。

上記の研究と並行して、格子QCDを用いて計算されるポテンシャルの系統誤差を減らす手法の研究にも取り組んだ。格子上では、本来有する連続回転対称性がなく正六面体群の対称性を有する。そのため、通常の軌道角運動量が格子上では良い量子数でなくなり、正六面体群の表現が良い量子数となる。これまで我々が計算してきた相互作用は、 $A_1$ 表現での相互作用であり、軌道角運動量 $L=0$ （S波）だけではなく、 $L\geq 4$ の寄与がわずかながら含まれてきた。特にこれまで計算してきたポテンシャルの長距離部分に揺らぎ（ヒゲ）として $L\geq 4$ の寄与は可視できるレベルで現れていた。そこで我々は、球殻の中の正六面体群の変換で結びつかない格子点を用いて $L\geq 4$ 以上の寄与を分離する手法（Misnerの方

法)を適用し、ポテンシャルに現れる $L \geq 4$ 以上の寄与を取り除くことに成功した。この研究内容は arXiv:1906.01987 で発表し、査読付き論文雑誌にて査読中である。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Morita Kenji, Gongyo Shinya, Hatsuda, Tetsuo, Hyodo Tetsuo, Kamiya Yuki and Ohnishi Akira: “Probing OmegaOmega and pOmega dibaryons with femtoscopic correlations in relativistic heavy-ion”, Phys.

Rev. C101 (2020) no.1, 015201

#### ●口頭発表 Oral Presentations

Shinya Gongyo for HAL QCD collaboration, “Baryon-Baryon interaction from lattice QCD”, Lattice 2019 (Plenary talk), Wuhan, China, Jun. 2019

Shinya Gongyo for HAL QCD collaboration, “Partial wave decomposition in lattice QCD”, International Molecule-type Workshop Frontiers in Lattice QCD and related topics, Kyoto, Japan, Apr. 2019

## XVI-007 Nuclear Mass Measurement of Super-Heavy Elements by Multi-Reflection Time-of-Flight Mass Spectrometry

Name: Marco ROSENBUSCH

Host Laboratory: SLOWRI Team, Instrumentation Development Group  
RIKEN Nishina Center for Accelerator-Based Science  
Laboratory Head: Hironobu ISHIYAMA

A new research proposal for symbiotic operation with in-beam gamma experiments at BigRIPS is presently under consideration by the RIBF program advisory committee (PAC). In-beam gamma spectroscopy of many exotic isotopes including the region around  $^{78}\text{Ni}$ ,  $^{100}\text{Sn}$ , and the island of inversion around  $^{56}\text{Ti}$  are proposed. We plan to measure those isotopes and others delivered by BigRIPS at the same time by replacing the beam dump (where ions are usually lost) with our gas-cell + MRTOF setup.

The multi-reflection time-of-flight mass spectrograph (MRTOF MS) for those symbiotic experiments at the BigRIPS facility has been finalized. M. Rosenbusch *et al.*, NIM B 463, 184-188 (2019), and a chamber containing ion traps for injection into the MRTOF MS has been attached. Furthermore, a periphery for a  $\text{Rb}^+$  ion source has been developed and assembled to provide constant electric fields around the surface of the source independent of the source position inside the setup. The new ion source is presently being installed at the trap chamber. Stable high-voltage power supplies for the MRTOF MS ion mirrors have been ordered and are delivered.

The proto-type gas-cell developments and tests (see

last report) were extended to include now the capability to use different frequencies for ion transport dedicated to different ion masses. For the final setup to move to the F11 position at BigRIPS, the mechanical support, the outer gas-cell chamber, and the inner gas-cell chamber (a copy of the prototype setup) have been assembled and ion-transport carpets can be inserted soon.

Scientific co-work for nuclear masses in collaboration resulted in fruitful new results. This includes the evaluation of rare-earth nuclei with mass numbers  $A=50\sim 80$  [W. J. Huang *et al.*, Eur. Phys. J. A 55, 96 (2019)] and nuclear mass measurements of isotopes around the neutron number  $N=20$  [P. Ascher *et al.*, Phys. Rev. C 100, 014304 (2019)]. Many more results have been published for developments including an on-line test of ion stopping from BigRIPS [T. Sonoda *et al.*, PTEP 11, 113D02 (2019)], a new MRTOF MS for the study of atomic clusters [S. Knauer *et al.*, Int. J. Mass Spectrom. 446, 116189 (2019)], a new detection technique combining MRTOF MS and laser spectroscopy [S. Lechner *et al.*, Hyperfine Interact. 240, 95 (2019)], and the finalization of the alpha-TOF framework as reported before [T. Niwase *et al.*, NIM A 953, 163198 (2020)]. A publication of my theory framework

on the mass accuracy of an MRTOF MS with a time-dependent ejection of ions from a storage trap has been finalized and is available online [M. Rosenbusch et al., IJMS 116346 (2020) <https://doi.org/10.1016/j.ijms.2020.116346>.

### ●Publications

- Conceptual Study on Parasitic Low-energy RI-beam Production with in-flight separator BigRIPS and the first stopping examination for high-energy RI-beams in the parasitic gas cell  
T. Sonoda, ... , M. Rosenbusch, ... 20 authors  
Prog. Theor. Exp. Phys. 11, 113D02 (2019)  
<https://doi.org/10.1093/ptep/ptz120>
- Development of an “ $\alpha$ -ToF” detector for correlated measurement of atomic masses and decay properties  
T. Niwase, ... , M. Rosenbusch, ... 15 Authors  
Nucl. Instr. Meth. A 953, 163198 (2020)  
<https://doi.org/10.1016/j.nima.2019.163198>
- Fluorescence detection as a new diagnostics tool for electrostatic ion beam traps  
S. Lechner, ... , M. Rosenbusch, ... 13 Authors  
Hyperfine Interact. 240, 95 (2019)  
<https://doi.org/10.1007/s10751-019-1628-1>
- High-stability, high-voltage power supplies for use with multi-reflection time-of-flight mass spectrographs  
P. Schury, M. Wada, H. Wollnik, M. Rosenbusch  
Rev. Sci. Instr. 91, 014702 (2020)  
<https://doi.org/10.1063/1.5104292>
- Evaluation of high-precision atomic masses of A ~ 50-80 and rare-earth nuclides measured with ISOLTRAP  
W. J. Huang, ... , M. Rosenbusch, ... 18 Authors  
Eur. Phys. J. A 55, 96 (2019)  
<https://doi.org/10.1140/epja/i2019-12775-5>

- A multi-reflection time-of-flight setup for the improvement and development of new methods and the study of atomic clusters  
S. Knauer, ... , M. Rosenbusch, ... 8 Authors  
Int. J. Mass Spectrom. 446, 116189 (2019)  
<https://doi.org/10.1016/j.ijms.2019.116189>
- Mass measurements of neutron-rich isotopes near N = 20 by in-trap decay with the ISOLTRAP spectrometer  
P. Ascher, ... , M. Rosenbusch, ... 17 Authors  
Phys. Rev. C 100, 014304 (2019)  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.100.014304>
- Inverse odd-even staggering in nuclear charge radii and possible octupole collectivity in  $^{217,218,219}\text{At}$  revealed by in-source laser spectroscopy  
A. E. Barzakh, ... , M. Rosenbusch, ... 67 Authors  
Phys. Rev. C 99, 54317 (2019)  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.99.054317>
- A new multi-reflection time-of-flight mass spectrograph for the SLOWRI facility  
Marco Rosenbusch, ... 16 Authors  
Nucl. Instr. Meth B 463, 184 (2019)  
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2019.05.058>
- First steps in the development of the Multi Ion Reflection Apparatus for Collinear Laser Spectroscopy  
S. Sels, ... , M. Rosenbusch, ... 16 Authors  
Nucl. Instr. Meth. B 463, 310 (2019)  
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2019.04.076>

### ●Oral Presentations

- Superheavy Elements 2019, Hakone, Japan, 01.12.2019 - 05.12.2019  
Talk: Dynamic Ejection-Field Correction for MR ToF Mass Spectrometry of SHE using Arbitrary Mass References

## Study of Strangelets, Lightning and Meteors from Space, Balloon and Ground with Next Generation, Ultra-Sensitive Detectors

Name: Lech Wiktor PIOTROWSKI

Host Laboratory: Computational Astrophysics Laboratory

RIKEN Cluster for Pioneering Research

Laboratory Head: Toshikazu EBISUZAKI

In FY2019 I was mostly involved in Mini-EUSO experiment. Mini-EUSO space mission is a small photomultiplier based camera to be observing Earth UV emission from International Space Station. The instrument has been successfully delivered to the International Space Station on 22.08.2019 and we are awaiting the first data. In the final stages of preparation I was involved in space qualification tests performed in Rome, and later in calibration with point and diffuse light sources. In addition, I continued to develop the off-line data storage format and quick-view and analysis tool for the telescope and other telescopes in the EUSO family.

In addition I developed initial track reconstruction and classification tools for Mini-EUSO using deep learning techniques. The results were presented on 第13回 アクセラレーション技術発表討論会 in Fukui, Japan.

However, through most of the FY2019 I was focusing on the search for strangelets in the “Pi of the Sky” experiment data. This was an on-ground optical experiment for monitoring large part of the sky - at its peak 1.5 sr - with 10 s time resolution, in search for GRBs optical counterparts. I was a member of the team before I came to Japan. Strangelets generate meteor-like signal which was not in the scope of interest of the experiment, therefore I had to write track finding algorithm and a simulator of strangelets for setting up detection limits. The work is almost completed at the moment of writing this report.

### ●Publications

#### Papers

Capel F., et al., Mini-EUSO (Extreme Universe Space Observatory) data acquisition and control software, accepted for publication in *Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, and Systems*

### ●Oral Presentations

#### International conferences

Piotrowski L., Overview of the results from EUSO-TA, JEM-EUSO Collaboration Meeting, 11.06.2019, Lodz, Poland

Piotrowski L., The search for strangelets - preliminary flux limits from Pi of the Sky experiment and perspectives for EUSO missions, JEM-EUSO Collaboration Meeting, 11.06.2019, Lodz, Poland

Piotrowski L., Quick view and data analysis for Mini-EUSO, JEM-EUSO Collaboration Meeting, 12.06.2019, Lodz, Poland

#### Japanese conferences

Piotrowski L., Linear Track Algorithm for Moving Objects, 30.08. 2019, 第13回 アクセラレーション

#### Japanese conferences

技術発表討論会, Fukui, Japan.

### ●Poster Presentations

Piotrowski L., Results and status of the EUSO-TA detector, 07.2018, Madison, USA

Piotrowski L., Limits on the flux of heavy stable macro particles from the “Pi of the Sky” project, Madison, USA

基礎科学特別研究員  
2017年度採用者



Name: Liyi GU

Host Laboratory: High Energy Astrophysics Laboratory  
RIKEN Cluster for Pioneering Research  
high energy astrophysics laboratory  
Laboratory head: Toru TAMAGAWA

*Galaxy clusters* - these enormous cosmic objects are thought to form gradually, starting from individual galaxies encountering each other due to the effect of gravity. The process passes on with the formation of groups, which then merge into bigger and bigger clusters through collisions. When galaxy clusters collide, shocks are excited at cosmological scales, transforming most of the kinetic energy carried by the cluster gaseous halos into heat and cosmic rays. Since clusters are huge, the collision takes billion years to complete.

In one of my research projects, I tracked the dramatic collision down to its beginning - the moment when two massive clusters touch each other for the first time. The first ‘kiss’, so-called pre-merger phase, has been left largely under-studied, as it has a short duration and is therefore hard to find. The target sources, 1E 2216 and 1E 2215, are shown in Figure 1.

I collected a total of 100-hours X-ray observations with XMM-Newton and Chandra, and 30-hours radio observations with LOFAR and GMRT. This project is a collaboration mainly with Dr. Akamatsu, Prof. Kaastra, and Dr. de Plaa from SRON, and Dr. van Weeren and Prof. Röttgering from Leiden. We reported the result in a *Nature Astronomy* paper [1].

The two clusters are connected by a very hot ( $> 10$  keV) gas bridge, on both sides of the bridge a shock front is seen propagating from the inside out along the equatorial plane. The ‘equatorial’ shock is somewhat surprising, since most shocks found in the merging clusters propagate along the vertical axis of the merger.

This discovery indicates a missing piece in the fundamental understanding of the shock excitation during cosmic structure formation. The physics driving the shocks, the bulk motion of the encounter gas halos, will be probed with the micro calorimeters on board XRISM and Athena missions. The new instruments might also help to understand the role of these shocks in the struc-

ture formation history.

## ● Publications

### Papers

- [1] Gu, L., Akamatsu, H., Shimwell, T. W., Intema, H. T., van Weeren, R. J., de Gasperin, F., Mernier, F., Mao, J., Urdampilleta, I., de Plaa, J., Parekh, V., Röttgering, H. J. A., and Kaastra, J. S. Observations of a pre-merger shock in colliding clusters of galaxies, *Nature Astronomy*, 3, 838, July 2019.
- [2] Gu, L., Raassen, A. J. J., Mao, J., de Plaa, J., Shah, C., Pinto, C., Werner, N., Simionescu, A., Mernier, F., and Kaastra, J. S. X-ray spectra of the Fe-L complex, *Astronomy & Astrophysics*, 627, A51:24, July 2019.
- [3] Smith, R., Hahn, M., Raymond, J., Kallman, T., Ballance, C.P., Polito, V., Del Zanna G., Gu, L., Hell, N., Betancourt-Martinez, G., Cumbee, R., Costantini, E., and Corrales, L. Roadmap on cosmic EUV and X-ray spectroscopy, *Journal of Physics B*, in press\*
- [4] de Plaa, J., Kaastra, J. S., Gu, L., Mao, J., Raassen, T., SPEX: High-resolution spectral modeling and fitting for X-ray astronomy, proceedings of ADASS XXIX conference, December 2019
- [5] Mernier, F., Werner, N., Lakhchaura, K., de Plaa, J., Gu, L., Kaastra, J., Mao, J., Simionescu, A., and Urdampilleta, I. How do atomic code uncertainties affect abundance measurements in the intracluster medium? *Astron. Nachr.* in press, November 2019
- [6] Mao, J., Mernier, F., Kaastra, J. S., Gu, L., Mehdipour, M., and de Plaa, J. the impact of improved plasma diagnostics on modeling the X-ray universe, *Journal of instrumentation*, 14, 07, pp. C07012, July 2019
- [7] Tamura, T., Fabian, A. C., Gandhi, P., Gu, L., Kamada, A., Kitayama, T., Loewenstein, M., Maeda,

Y., Matsushita, K., McCammon, D., Mitsuda, K., Nakashima S., Porter, S., Pinto, C., Sato, K., Tombe-  
si, F., and Yamasaki, N. an X-ray spectroscopic  
search for dark matter and unidentified line signa-  
tures in the Perseus cluster with Hitomi, Publications  
of the Astronomical Society of Japan, 71, 50, June  
2019

### ●Oral Presentations

Conferences

[1] Gu, L. “Observational Evidence for a Pre-Merger  
Shock in Colliding Clusters of Galaxies”, SKA sym-  
posium-cosmic magnetism, NAOJ, Japan,

2019/11/12

[2] Gu, L. “Plasma and atomic astrophysics”, XCalibur  
2019, Winchester, 2019/07/15

1. Items to be submitted

Electronic file: Should be a Word document to  
kisonenpo@riken.jp

2. Deadline: 9am, January 24, 2020

3. Content and style

The content and style of your draft should be as  
shown below.

Only text allowed. No charts or diagrams

XVII-002

### 天の川銀河中心における爆発現象の発生メカニズム解明

#### Unveiling the Origin of an Explosive Event in the Galactic Center

研究者氏名: 中島 真也 Nakashima Shinya

受入研究室: 開拓研究本部

玉川高エネルギー宇宙物理研究室

(所属長 玉川 徹)

銀河の中心部は大質量ブラックホールや、それを  
とりまく多数の星・高密度のガスが存在するユニ  
ークな領域であり、その活動が周囲に及ぼす影響（フ  
ィードバック）は銀河進化を解き明かす鍵である。  
実際、われわれの太陽系が属する天の川銀河でも銀  
河中心部から噴き出す巨大な双極状構造が見つか  
っており、天の川銀河中心で起きた過去の爆発現象が  
起源と考えられている。しかし、そのような爆発が  
どのように起こったのかはまだ明らかになっていな  
い。本研究はX線分光観測を用いて、噴き出しの主  
成分である高温プラズマの性質を調べることで、爆  
発現象の起源を探ることが目的である。

本年度はすざく衛星を観測データを用いて、銀河中  
心付近に 100 pc スケールの小規模なプラズマの吹  
き出しが存在することを発見した。そのX線イメージとスペクトルを詳細に解析し、磁場によってコリ  
メートされた吹き出しという描像を提案した。その  
成果が認められ、国際会議 Galactic Center  
Workshop 2019 で招待講演を行なった。

上記の研究と並行して、次世代X線天文衛星の開

発も行なった。2021年度末打ち上げ予定の「XRISM」  
の運用計画を策定した。また、さらに先の衛星計画  
を考えるために、大規模な宇宙論シミュレーション  
のデータを解析し、宇宙全体に薄く広がる高温ガス  
を検出するためにはどの程度の感度が必要なのかの  
見積もりも行なった。

### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Shinya Nakashima, Katsuji Koyama, Q. Daniel Wang,  
Rei Enokiya: “X-ray Observation of a Magnetized  
Hot Gas Outflow in the Galactic Center Region”,  
ApJ, 875, 32 (2019)

### ●口頭発表 Oral Presentations

Shinya Nakashima “Recent progress in X-ray observa-  
tions of outflows from the Galactic Center”, Galactic  
Center Workshop 2019, Yokohama, Japan, October  
24 (2019).



XVII-003

クォーク・グルーオンの非摂動的性質から探る  
QCDの新たな相構造の第一原理的探求

First-principle investigation of QCD phase structure from  
non-perturbative properties of quarks and gluons

研究者氏名: 土居孝寛 Takahiro Doi  
受入研究室: 仁科加速器科学研究センター  
量子ハドロン物理学研究室  
(所属長 初田哲男)

本研究の目的は、クォーク・グルーオンの強い相互作用を記述する基礎理論である Quantum Chromodynamics (QCD) の相構造及びそこで現れる新しい現象を調べる事である。今年度は、本研究課題達成のための基礎研究として「符号問題が現れる冷却原子系の研究」「Lefschetz thimble法を応用した非摂動的解析手法の開発」の2つの研究を進めた。

QCDの相構造を調べるためには、有限密度におけるQCDの解析は避けて通れない。しかし、モンテカルロシミュレーションによる格子QCDの第一原理的計算を有限密度において実行するのは非常に困難である。これは符号問題と呼ばれ、理論物理学・計算科学の未解決問題の1つである。「符号問題が現れる冷却原子系の研究」では、冷却原子系の詳細な研究を通じて符号問題に対する有効な手法の開発を目指した。符号問題は冷却原子系にも現れ、冷却原子系における符号問題の起源はQCDと類似しており、かつ冷却原子系は解析がQCDよりも簡単で実験との比較も可能である。この研究を有限密度における格子QCDに応用することを目指す。現時点では1次元冷却原子系の解析がほぼ完了しており、2次元系や3次元系に進む準備を整えているところである。

また、Lefschetz thimble法を最適化された摂動論(OPT)に応用する研究も行った。OPTでは任意パ

ラメータを導入して摂動論を改良する手法であるが、その任意パラメータの決め方の1つであるFAC条件について、符号問題の文脈でよく扱われるLefschetz thimble法に基づく解析を行うことで理解を深めた。その結果、OPTの展開次数を増加するとFAC条件の解は限りなく anti-Stokes line に近づき、そこでは古典近似が使えることを示した。

これらの研究成果は私の設定した研究課題を直接解決するものではないが、課題解決に向けた着実な進歩であり学術的にも興味深いと考えている。

●誌上発表 Publications

(原著論文)

Tsutsui S., Doi T.: “Distribution of solutions of the fastest apparent convergence condition in optimized perturbation theory and its relation to anti-Stokes lines”, *Annals Phys.* 409, 167924 (2019) \*

●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

土居孝寛, 田島裕之, 筒井翔一郎: “複素ランジュバン法によるインバランスのある2成分フェルミ気体の第一原理計算”, 日本物理学会2019年秋季大会(物性), 岐阜, 9月(2019).

XVII-004

Nucleosynthesis and Jets in Neutron-Star Mergers  
and the Explosion Mechanism of Massive Stars

Name: Oliver JUST

Host Laboratory: Astrophysical Big Bang Laboratory

RIKEN Cluster for Pioneering Research

Laboratory Head: Shigehiro NAGATAKI

Early on during this fiscal year I finished a collaboration project with a student at MPA Garching, Germany

on neutrino transport, of which the paper has been successfully accepted. The paper presents the first flux-

limited diffusion scheme in a general relativistic framework. This scheme can be used in the future to study a neutron star newly born in a core-collapse supernova or resulting after a binary neutron star merger. I also wrote and contributed to two proceedings articles. Moreover, I made significant progress in the construction of my numerical models of jets and hyper-massive neutron stars, which both are an outcome of neutron-star mergers. Several problems had to be overcome, e.g. concerning the jet injection and the convergence of my primitive variables solver in my relativistic simulations. These problems are now solved and the simulations run robustly. Results of my jet simulations are currently being investigated together with my collaborators Dr. Hiroataka Ito at ABL (who is a GRB emission expert) and Prof. Stephane Goriely in Brussels (who is a nucleosynthesis expert). In the meantime I investigate my simulations of hyper-massive neutron stars that I have also constructed this year. Moreover, another study about the nucleosynthesis yields of black hole torus systems is currently in the making.

#### ●Publication

##### Original Papers

- Rahman N., Just O., Janka H.-Th.: NADA-FLD: A General Relativistic, Multi-dimensional Neutrino-Hydrodynamics Code Employing Flux-limited Diffusion, *MNRAS*, 2019, 490, 3545 \*
- Just O., Bauswein A., Goriely S., Ito H., Janka H.-Th., Nagataki S.: How to interpret observations of neu-

tron-star mergers? *IOP Proceedings*, 2019, in print \*  
 Bauswein A., Friedrich Bastian N., Blaschke D., Chatzizoannou K., Clark J.A., Fischer T., Janka H.-Th., Just O., Oertel M., Stergioulas N.: Equation-of-state Constraints and the QCD Phase Transition in the Era of Gravitational-Wave Astronomy, *AIP*, 2019, 2127, 020013 \*

#### ●Oral Presentation

##### Conference

Just O.: “How to deal with neutrinos in simulations of neutron-star mergers and core-collapse supernovae?”, *Nuclear and Astrophysics Aspects for the R-Process*, Trento, Italy, July 2019

Role of Neutrinos in Neutron-Star Mergers, *Japan-Israel Meeting in High-Energy Physics*, RIKEN, Tokyo (Japan), July 2019

O. Just: “What can we learn about the r-process and nuclear equation of state from neutron-star merger observations?”, *GSI FAIRNESS Workshop*, Genova, Italy, May 2019

##### Workshop

Just O.: “What can we learn from observations of neutron-star mergers?”, *R-EMU collaborative center meeting*, RIKEN, August 2019

#### ●Poster Presentation

Just O.: “Nucleosynthesis and Jets in Neutron-Star Mergers and the Explosion Mechanism of Massive Stars”, *SPDR report poster session*, January 2020

## XVII-005      CONFINEMENT AND DECONFINEMENT IN QCD WITH EFFECTIVE FIELD THEORIES AND HIGHER-ORDER PERTURBATIVE CALCULATIONS

Name: Matthias BERWEIN

Host Laboratory: Quantum Hadron Physics Laboratory

RIKEN Nishina Center for Accelerator-Based Science

Laboratory Head: Tetsuo HATSUDA

I started fiscal year 2019 by finishing the publication of paper (1). After quite a long time of deliberating with my coauthors and several rewrites, this rather technical but fundamentally interesting project was fi-

nally concluded. It deals with the apparent contradiction that effective theories for heavy quarks are typically formulated in terms of nonrelativistic fields, which seems to break Poincaré symmetry, and yet the

effective theory is expected to be fully equivalent to the underlying fundamental theory, which is relativistic. This issue is resolved by showing through explicit constructions that transformation laws of the heavy quark fields can be defined for all generators, if the generators are allowed to depend on the fields. Thus, the full symmetry is restored if the parameters of the effective theory obey certain constraints. This is particularly useful in the construction of new effective theories, as these constraints reduce the number of free parameters to be determined.

After I previously obtained the perturbative two-loop result for the static quark potential in the Maximal Abelian gauge from my employment at Tohoku University, there remained several open questions. In 2019 I had several meetings with my collaborators about how to proceed. Since none of the avenues we explored ultimately yielded promising results, we finally agreed to publish the finished result on the potential as a stand-alone paper (2) and leave the open questions for later. The publication process itself was free of problems and finished at the end of 2019.

At the center of this research lies the phenomenon of Confinement in QCD. A popular explanation links it to the phenomenon of superconductivity by observing the analogy in the behavior of the respective fields. There exists a certain class of gauges, the Maximal Abelian gauge among them, in which the analogy becomes more prominent, as the gauge condition introduces magnetic monopoles in the gauge fields, which may condense in a similar fashion to how the condensation of electrons in Cooper pairs causes superconductivity. Lattice simulations have produced ample data to support this notion, yet analytic results to compare with are scarce. This is why the result of our perturbative calculation is so interesting.

It also highlights the difficulties involved. While there are technical challenges involved, as the number of relevant Feynman diagrams is larger by an order of magnitude than in the corresponding calculation in Feynman gauge, for instance, the most difficult issue is

of a fundamental nature. Perturbative calculations typically are performed in a class of gauges depending on a certain parameter  $\xi$ , where only the particular value  $\xi=0$  corresponds to the original gauge condition. While the Maximal Abelian gauge allows one to separate the monopole contribution through an Abelian projection, this projected result requires a renormalization of the  $\xi$  parameter in addition to the gauge coupling in order to remove all ultraviolet divergences. However, the renormalization group equations for  $\xi$  make it impossible to take the limit to zero, thereby prohibiting an evaluation in exact Maximal Abelian gauge. We have searched for a way to circumvent this problem, but to no avail. This is why I have decided to start a new line of research on the suggestion from my supervisor.

The gradient flow formalism has gained fast popularity among the lattice community for its ability to stabilize calculations with a lot of noise. The central concept is the extension of the fields in a new dimension, the flow time  $t$ . Real world results are then obtained through extrapolation of the flow time to zero. As a relatively new field, there remains a lot of work to be done. As my specialty are perturbative calculations, I would like to contribute new results to complement lattice studies. While the energy-momentum tensor in the vacuum is already well studied, in medium studies are still lacking and should provide ample opportunities for interesting discoveries in the future. I am presently studying the existing literature to prepare for this project.

## ● Publications

- 1.) Poincaré invariance in NRQCD and potential NRQCD revisited, Matthias Berwein, Nora Brambilla, Sungmin Hwang, and Antonio Vairo, Phys. Rev. D 99, 094008 - Published 9 May 2019
- 2.) Perturbative static quark potential in Maximal Abelian gauge, Matthias Berwein and Yukinari Sumino, Physics Letters B, Volume 799, 10 December 2019, 135014

Quest for Begin of the Universe with the Combination of High-speed Modulation  
and Large Array of Millimeter-wave Sensors: Inflationary Universe and Dark Matter

研究者氏名: 小栗 秀悟 Shugo Oguri

受入研究室: 光量子工学研究センター

テラヘルツイメージング研究チーム

(所属長 大谷 知行)

本研究の目的はインフレーション宇宙論の実験的検証と、ダークマターの探索である。独自の電波望遠鏡の技術を用いてこれに挑む。

宇宙初期の高温高密度の状態（ビッグバン）時に発せられた黒体放射は、現在、電波望遠鏡で捉えることができ、宇宙マイクロ波背景放射（CMB）と呼ばれている。このCMBの偏光マップのパターンに刻まれた原始重力波の痕跡を捉え、ビッグバン以前の宇宙を解明する。

昨年は、8ヶ月に亘って観測地のテネリフェに滞在し、望遠鏡立ち上げの陣頭指揮をとった。本年度前半は、実験環境の構築を行った。

## 1. 望遠鏡の受信機の修理

日本から輸出する際、内部構造体が破損したため、その修理を行った。故障箇所は、40Kに冷却する第一ステージの放射シールドを支える足の部分で、ガラスエポキシ樹脂のパイプが16本全て折れていた。現地研究室で一度解体し、再度組み上げることで、故障箇所の修理を行った。

## 2. 電力ラインの整備

ヨーロッパの電源システムは230V単相・400V三相であるのに対し、本実験で使用する装置は日本式の100V単相・200V三相用に準備していたため、電圧の変換が必要であった。また、実験室でのテストでは、変圧器の突入電流によってブレーカーが誤作動するというトラブルもあり、ブレーカーの電流許容量を調整する、という交渉も必要であった。9月上旬に観測サイトの電力ラインを整備した。

## 3. 望遠鏡の架台のインストール

望遠鏡の姿勢を制御する回転架台のインストールを行った。架台を地面に固定する作業では、使用するアンカーを自ら選定して調達し、現地研究所の技術スタッフに直接指示を出して設置した。

## 4. 受信機冷却時の排熱トラブルに対する対処

実験室での受信機内部の冷却テストを始めたところ、

実験室の空調トラブルが発覚し、冷凍機の排熱ができずに実験中止を余儀なくされた。しかし、空調の修理を待つと数ヶ月の実験の遅れが生じるため、現地研究員のロジャー氏、マイク氏と連携し、冷凍機の排熱システムのみ屋外に移設した。急遽現地に、排熱システムの防水対策等を施し、数日で実験を再開することができた。

8月に一度帰国し、理研の美馬氏と協力し、検出器及びその読み出し回路構築に必要なパーツの輸出作業を行った。その後、再びテネリフェに渡航し、試験運用にこぎつけた。

## 5. ネットワーク・サーバーシステムの構築

CMB観測実験ではデータ量が莫大になるため、ストレージの整備が必須である。また、日本とスペイン間でのデータの転送も行う必要がある。技術スタッフのホルヘ氏と連携することで、本実験専用のサブネットを立ち上げ、NASを立ち上げて各サーバーとデータの共有するシステムを構築した。

## 6. 望遠鏡の読み出しシステム

本実験では、受信機を分速20回転させて高速スキャンを行う。その際、測定データと受信機の方位角の記録の同期を取ることが必要不可欠である。京大の池満氏を指導してFPGA回路を構築し、また、同期システムのハードウェア部分を自ら構築することで、目標精度0.1度を実現した。また、解析で同期を取るためのライブラリも構築した。

試験運用では、天体（月）の観測を行い、設計と遜色ない角度分解能を実現できていることを確認した。また、24時間以上に及ぶ空の観測を行い、長時間測定も問題ないことを確認した。

## ●誌上发表 Publications

(原著論文)

H. Kutsuma, M. Hattori, R. Koyano, S. Mima, S. Oguri, C. Otani, T. Taino, O. Tajima : “A measurement

method for responsivity of microwave kinetic inductance detector by changing power of readout micro-

waves”, *Appl. Phys. Lett.*, 115, 032603, (2019).

## XVII-007

## Multimessenger Search for the Origin of Neutrinos

Name: Haoning HE

Host Laboratory: Astrophysical Big Bang Laboratory

RIKEN Cluster for Pioneering Research

Laboratory Head: Shigehiro NAGATAKI

The origin of IceCube neutrinos is still an open question. Since there is no significant anisotropy detected for the neutrino skymap, the galactic sources should not be the dominant sources of neutrinos. However, as the increasing of the statistics by time, the galactic and nearby sources might be observed by IceCube or IceCube GenII as significant sources. The future observations by the high energy gamma-ray detectors Cherenkov Telescope Array (CTA) and the Large High Altitude Air Shower Observatory (LHAASO) will help to find those galactic and nearby neutrino source candidates.

In our galaxy, if a supernova is associated with molecular clouds (MCs). Protons are accelerated by the supernova remnant (SNR), and the high energy tail of the accelerated protons will escape from the SNR. The escaped protons propagate around, and interact with the MCs, then produce high energy neutrinos and gamma-rays. We make predictions for the future observations by LHAASO and IceCube on such a SN associated with MCs source.

The High-Energy Stereoscopic System (H.E.S.S.) has detected an extended region of diffuse TeV gamma-ray emission around the Galactic Center (GC), indicating a peta-electrovolt accelerator (‘PeVatron’) in the GC. We assume a past hypernova locating in the GC. We simulate the acceleration of CRs in the hypernova remnant (HNR) and meanwhile their confinement and escape. We find out that the past hypernova in the GC can contribute to H.E.S.S. observations at energy above 10 TeV, and predict a cutoff of the gamma-ray spectrum at 100 TeV, which can be tested by the further observations. We estimate the counts of neutrinos from the GC region that can be detected by IceCube, and find out that it is consistent with the current IceCube

observations. We make predictions for the future observation on the GC for CTA and LHAASO, their future observation will constrain our model.

### ●Publication

He H., Wu X.: The Messenger Traveling Across the Universe, Chinese Science Bulletin, 2019, Volume: 64, issue: 22, Page: 2265

He H., Lee S., Nagataki S., Kusenko A.: Neutrinos from the Galactic Center Hosting a Hypernova Remnant, the Astrophysical Journal, submitted\*

### ●Oral Presentation

He H.: Perspective of Detecting Very High Energy Gamma Ray Photons Associated with Neutrinos by LHAASO, The 10th International Workshop on Air Shower Detection at High Altitude, Nanjing China, January (2020)

He H., Nagataki S., Kusenko A., Fan Y., Wei D.: Neutrinos from Choked Jets Accompanied by Type-II Supernovae, Subaru Telescope 20th Anniversary, Hawaii USA, November (2019)

He H., Lee S., Nagataki S., Kusenko A.: Neutrinos From The Galactic Center Hosting A Hypernova Remnant, Galactic Center Workshop, Yokohama Japan, October (2019)

He H.: Astrophysical Diffuse models from 1 TeV to 1 EeV, Diffuse Workshop on Global Fit, Tokyo Japan, September (2019)

He H.: On the Origin of IceCube Observed High Energy Neutrinos, Workshop to bring together experts on High Energy Astrophysics from Japan and Israel, Wako & Kobe Japan, July (2019)

He H., Lee S., Nagataki S., Kusenko A.: Neutrinos

From A Past Hypernova In The Galactic Center, the 6th AMON workshop, Chiba Japan, May (2019)  
He H., Nagataki S., Kusenko A., Fan Y., Wei D.: High Energy Neutrinos from the Deaths of Massive stars,

Conference on Gamma-Ray Bursts and Related Astrophysics in Multi-Messenger Era, Nanjing China, May (2019)

## XVII-008 Probing the Heavy-Flavored Hadron Structure from Lattice QCD

Name: Kadir Utku CAN

Host Laboratory: Strangeness Nuclear Physics Laboratory

RIKEN Nishina Center for Accelerator-Based Science

Laboratory Head: Emiko HIYAMA

As an on-going Turkish-Japanese collaborative effort on charmed baryon phenomenology, we have continued our calculations on the form factors of charmed baryons and kept focusing on spectrum calculations. We have taken the initial steps to investigate the exotic pentaquark states as well.

[1] In this contribution we have detailed our calculations of the spectrum of the baryons that contain at least one charm quark. In the charmed baryon sector, experimental data is available mostly for the singly charmed baryons. Recently LHCb Collaboration have reported several  $\Omega_c$  states and the observation of a doubly charmed  $\Xi_{cc}$  baryon. From ab initio theoretical calculations on the other hand, it is possible to provide predictions and predictions for charmed baryons and hence test and expand our understanding of the strong interactions. The wealth of lattice QCD results in the literature about charmed baryon spectroscopy are focused on the ground states of these baryons. The agreement between the theoretical and experimental results is remarkable and a big achievement for the lattice method. However, excited states are harder to calculate and just a few lattice groups tackle this problem. In our work, we not only calculate the masses of the ground states of the charmed baryons, but also, extract the masses of their first few excited states via employing a variational approach over several baryon operators. Our ground state results are in very good agreement with the available experimental results and the predictions of other groups. We find good agreement for the excited states as well and provide predictions for the masses of the yet unobserved excited charmed baryons.

Final results and the details of this analysis will be presented in a future paper.

[2] In this work we present a quark model calculation of compact  $sssc\bar{c}$  pentaquark states. By employing a suitable Hamiltonian and the state-of-the-art Gaussian expansion method for solving the five-body system, we predict four sharp resonances with the quantum numbers along with their masses and widths,  $J^P = 1/2^-$  ( $E = 5180 \text{ MeV}$ ,  $\Gamma = 20 \text{ MeV}$ ),  $5/2^-$  ( $E = 5645 \text{ MeV}$ ,  $\Gamma = 30 \text{ MeV}$ ),  $5/2^-$  ( $E = 5670 \text{ MeV}$ ,  $\Gamma = 50 \text{ MeV}$ ) and  $1/2^+$  ( $E = 5360 \text{ MeV}$ ,  $\Gamma = 80 \text{ MeV}$ ). Note that we have taken the relevant meson-baryon thresholds into account and checked the genuineness of these states via employing the real-scaling method. These four resonances are candidates for compact pentaquark states from the current best quark model, which should be confirmed by experimental searches or ab initio lattice QCD calculations.

### ● Publications

Papers

- [1] Kadir Utku Can, Huseyin Bahtiyar, Guray Erkol, Philipp Gubler, Makoto Oka, Toru T. Takahashi, Spectrum of the Charmed Baryons in 2+1-flavor Lattice QCD, JPS Conf. Proc. (conference proceedings, accepted)
- [2] Qi Meng, Emiko Hiyama, Kadir Utku Can, Philipp Gubler, Makoto Oka, Atsushi Hosaka, Hongshi Zong, Compact  $sssc\bar{c}$  pentaquark states predicted by a quark model, Phys. Lett. B (in press)

●Oral Presentations

Conferences

15th Rencontres du Vietnam, Perspectives in Hadron

Physics, September 22nd - 28th, 2019, Quy Nhon,  
Vietnam.

XVII-009

化学進化から探る分子雲コアの初期条件と  
星 / 惑星系形成の新モデルの構築

Establishing the Star and Planet Formation Scenario by Revealing the  
Initial Conditions of Molecular Cloud Cores with the Chemical Evolution

研究者氏名: 大橋 聡史 Satoshi Ohashi

受入研究室: 開拓研究本部

坂井星・惑星形成研究室

(所属長 坂井 南美)

原始惑星系円盤は惑星の誕生現場と考えられている。近年のALMAによる撮像観測によって原始惑星系円盤にはいくつものリング構造が見つかってきており、リング構造が惑星形成と関連していることが考えられる。惑星形成は星間空間にあるダスト(サイズ~0.1 ミクロン)が大きな惑星へと成長する過程と考えられ、このリング構造がダスト成長を行う現場であると予想されている。

そこで本研究では、ダストの散乱偏光に着目し、ALMAによる波長860ミクロンの連続波偏光観測と輻射輸送計算によるモデルとの比較を行った。その結果、リング上ではダストが散乱しないサイズ(100ミクロンより大きい、あるいは小さい)が存在し、リングの間隙には散乱するダスト(サイズ100ミクロン)が分布すると観測をよく説明できることがわかった。さらに間隙のスケールハイトがリングの外側ではフレアアップしている様子を示し、乱流遷移によるリング形成とその場でのダスト成長の可能性を示した。これはリング形成とその場でのダスト成長を示す新たな観測結果であり、惑星形成シナリオの一つの可能性として提唱した。

●誌上発表 Publications

(原著論文)

Satoshi Ohashi, Akimasa Kataoka: “Radial Variations in Grain Sizes and Dust Scale Heights in the Protoplanetary Disk around HD 163296 Revealed by ALMA Polarization Observations”, *Astrophysical Journal*, 886, 103, (2019)

Sanhueza Patricio, Contreras Yanett, Wu Benjamin,

Jackson James M., Guzmán Andrés E., Zhang Qizhou, Li Shanghuo, Lu Xing, Silva Andrea, Izumi Natsuko, Liu Tie, Miura Rie E., Tatematsu Ken'ichi, Sakai Takeshi, Beuther Henrik, Garay Guido, Ohashi Satoshi, Saito Masao, Nakamura Fumitaka, Saigo Kazuya, Veena V. S., Nguyen-Luong Quang, Tafuya Daniel: “The ALMA Survey of 70  $\mu$  m Dark High-mass Clumps in Early Stages (ASHES). I. Pilot Survey: Clump Fragmentation”, *Astrophysical Journal*, 886, 102, (2019)

Takekoshi Tatsuya, Fujita Shinji, Nishimura Atsushi, Taniguchi Kotomi, Yamagishi Mitsuyoshi, Matsuo Mitsuhiro, Ohashi Satoshi, Tokuda Kazuki, Minamidani Tetsuhiro: “Nobeyama 45 m Cygnus-X CO Survey. II. Physical Properties of C18O Clumps”, *Astrophysical Journal*, 883, 156, (2019)

Mori Tomohiro, Kataoka Akimasa, Ohashi Satoshi, Momose Munetake, Muto Takayuki, Nagai Hiroshi, Tsukagoshi Takashi: “An Observational Study for Grain Dynamics in the AS 209 Disk with Submillimeter Polarization”, *Astrophysical Journal*, 883, 16, (2019)

Chen Hwei-Ru Vivien, Zhang Qizhou, Wright M. C. H., Busquet Gemma, Lin Yuxin, Liu Haiyu Baobab, Olguin F. A., Sanhueza Patricio, Nakamura Fumitaka, Palau Aina, Ohashi Satoshi, Tatematsu Ken'ichi, Liao Li-Wen: “Filamentary Accretion Flows in the Infrared Dark Cloud G14.225-0.506 Revealed by ALMA”, *Astrophysical Journal*, 875, 24, (2019)

●口頭発表 Oral Presentations

Satoshi Ohashi: “Observations for protoplanetary disks: From ALMA to ngVLA”, next generation VLA workshop, NAOJ, Sep 17-20, 2019

Satoshi Ohashi: “Radial variations of grain sizes and dust scale heights of the protoplanetary disk around HD 163296 revealed by ALMA polarization observation”, Planet Formation Workshop 2019, NAOJ, Mitaka, Japan, Nov 25-28, 2019

Satoshi Ohashi: “Understanding distributions of grain sizes and turbulence in protoplanetary disks”, Science with the Submillimeter Array: Present and Future, ASIAA, Taipei, Taiwan, Nov 4-5, 2019

Satoshi Ohashi: “Radial variations of grain sizes and dust scale heights on the protoplanetary disk of HD

163296”, ALMA2019: Science Results and Cross-Facility Synergies, Cagliari, Italy, Oct 14-18, 2019

Satoshi Ohashi: “Grain size distributions in HD 163296 studied by ALMA polarization observation”, Great Barriers in Planet Formation, Cairns, Australia, July 21-26, 2019

Satoshi Ohashi: “Radial variations of grain size in the HD 163296 protoplanetary disk revealed by ALMA polarization”, Workshop on Polarization in Protoplanetary Disks and Jets, Sant Cugat, Spain, May 20-24, 2019

## XVII-010 Development of Portable Atomic Clocks with 10E-18 Uncertainty

Name: Andrew HINTON

Host Laboratory: Space-Time Engineering Research Team

RIKEN Center for Advanced Photonics (RAP)

Laboratory Head: Hidetoshi KATORI

Atomic clocks play an important role in modern physics as precision tools for tests of fundamental constants, geodesy, and improved navigation references, to name but a few examples. Highly efficient generation of ultracold atoms in a portable format is an important enabler for many of these applications to become reality. In general, an atomic frequency measurement has a limited achievable instability defined by the quantum projection noise (QPN), which scales as the square-root of the cycle time divided by the number of measured atoms. Whilst optical lattice clocks already enable one to approach  $10^{-18}$  uncertainty with low instability by interrogating many atoms trapped in an optical lattice; there is now a global effort on methods to reduce the cycle time and approach QPN limited stability. In this work we present one approach to improve the stability of optical lattice clocks by using a novel cooling scheme to reduce dead time in measurements.

Atomic species, such as strontium and ytterbium, commonly used in clocks have a low vapour pressure which necessitates heating to several hundred Kelvin to

obtain a reasonable flux of atoms. In order to reduce this temperature to  $\mu$  K levels, typically two stages of cooling are employed - a broad-line cooling which reduces the temperature of the hottest atoms and a narrow-line cooling which reduces the temperature further. As these two cooling transitions share a common ground state, it is impossible to operate them simultaneously in the same physical location and so cooling is necessarily done in a time-sequential manner. Our method reduces atomic temperature from significantly hotter than ambient to a few  $\mu$  K in a continuous manner by physically separating the broad-line and narrow-line cooling regions and transporting the atoms over a distance of 42 mm. Efficient transport is enabled by utilising cooling on a metastable transition which has two essential benefits. Firstly, the lower atomic temperature achieved by the metastable cooling as compared to the broad-line cooling reduces atomic spatial expansion during the transport, allowing the atoms to be readily recaptured. Secondly, the metastable cooling shares no transitions with broad-line or narrow-line



cooling allowing it to be continuously operated without perturbing standard cooling procedures.

In this way, we realised continuous generation of cold strontium atoms with a temperature  $< 10 \mu\text{K}$ . Work is underway to achieve dead-time reduced spectroscopy measurements by loading the cooled atoms into a moving 1D optical lattice which acts as an “atom conveyor belt” for continuous clock interrogation.

To meet the growing need for compact and portable quantum devices, the experiment has been realised in a small, bespoke vacuum system which fully integrates

most of the necessary optics and electromagnetic fields for atomic cooling and clock measurements inside an ICF152 nipple with a length of approximately 300 mm.

### ●Poster Presentations

Conference

Hinton A., Takahashi T., Harada N., Yamano S., and Katori H.: “Design of a Continuously Operated Optical Lattice Clock with Novel Cooling Schemes”, RAP Symposium, RIKEN Wako Campus, December (2019)

XVII-011

### ストレンジネスとチャームで探るバリオン構造の研究

#### Study of Baryon Structure with Strangeness and Charm

研究者氏名: 浅野 秀光 Asano Hidemitsu

受入研究室: 開拓研究本部

岩崎中間子科学研究室

(所属長 岩崎 雅彦)

バリオンがどのようにしてクォークから形成されているのか? その答えとして、単純な構成子クォークモデルでは不十分であることが明らかになっている。そこで、本研究ではこのハドロン物理の基本問題に対して、ストレンジクォークやチャームクォークという不純物を入れたバリオンを生成し、バリオン中の3つの構成子クォーク以外の有効自由度を浮き立たせることで取り組む。そのために、大強度陽子加速器施設J - PARCにて2つの実験 (E31, E50) を行っている。

E31実験ではK1.8BRビームラインで1.0 GeV/cの運動量を持つK中間子ビームを用いて、 $\Lambda(1405)$ 分光を行う。 $\Lambda(1405)$ は、ストレンジクォークを持っていながら、負パリティを持つ全てのバリオンの中で最も軽い。この性質は、3つの構成子クォーク以外の有効自由度に由来すると思われる。

$\Lambda(1405)$ は、反K中間子と核子が束縛して分子状態となっているという理論予想があり、それを分光実験で確認する。

E50実験では、高運動量ビームラインで20 GeV/cの運動量を持つ $\pi$ 中間子ビームを用いて、チャームクォークが入ったバリオンの分光実験を行う。チャームバリオンの中では、チャームクォークが重たいため、残りの2つの軽いクォーク間の相関をあぶ

り出して調べることができる。この実験では、チャームバリオンの励起状態の質量スペクトルや、崩壊事象を系統的に調べることで、観測量に反映されるクォーク相関の性質を明らかにする。

本年度はE31実験の解析を行った。 $\Lambda(1405)$ は、最終的に中性子と $\pi^+$ 中間子と $\pi^-$ 中間子の3体に崩壊するチャンネルを持つ。この崩壊モードで不変質量分布を解析する利点は、重水素標的から蹴り出された中性子は欠損質量法によって識別するので、検出器のアクセプタンスによる制約を受けないことである。そのことにより、 $\Lambda(1405)$ 生成反応の運動量移行依存性を広い範囲で調べることができる。

私はこの崩壊モードに着目し、この3種類の粒子を検出器で識別し、不変質量分布の解析を行った。結果 $\Lambda(1405)$ 共鳴に対応するピークを確認することに成功した。

現状では、未だ不変質量分布にバックグラウンド事象が含まれているのが、課題である。この点についてGEANT4によるシミュレーションを行った結果、ソレノイド磁石上で起こる原子核反応に由来する中性子またはガンマ線が、見たい不変質量分布の中にバックグラウンドを作っていることが判明した。さらに $\bar{K}^0 nn$ 終状態という物理プロセスもデータに混入してくるということが判明した。現在、こ

れらバックグラウンドの評価を定量的に行っているところである。

またE50実験のためのシンチレーティングファイバーを用いた、散乱粒子飛跡検出器の試作を進めた。

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

浅野秀光: “K中間子ビームを用いた $\Lambda$ (1405)の研究”, 「物質階層原理研究」 & 「ヘテロ界面研究」  
合同春合宿, 御殿場市, 5月(2019)

### XVII-012 Single-particle Energies and Strengths Around $^{100}\text{Sn}$ and $^{132}\text{Sn}$

Name: Frank BROWNE

Host Laboratory: Radioactive Isotope Physics Laboratory

RIKEN Nishina Center for Accelerator-Based Science

Laboratory Head: Hiroyoshi SAKURAI

The objective of the research project is to enhance our knowledge of magic nuclei and their immediate neighbors through spectroscopy following nuclear reactions. Experiments on  $^{100,132}\text{Sn}$  are to be conducted in the near future. Analogous investigations into the non-canonically doubly magic  $^{54}\text{Ca}$  isotopes have been carried out through direct reactions, the likes of which shall be employed in the  $^{100,132}\text{Sn}$  studies. Building on last year's achievements of identifying new excited states in  $^{54}\text{Ca}$ , the microscopic structure of these states, as well as the previously reported states, have been experimentally characterized. This was achieved through measuring the exclusive momentum distributions of the outgoing  $^{54}\text{Ca}$  reaction residues in coincidence with the population of excited and ground states. For neutron knockout from  $^{55}\text{Ca}$ , the momentum distribution of  $^{54}\text{Ca}$  in coincidence with population of its ground-state is consistent with an f-wave neutron removal, whilst showing a p-wave distribution for both the  $3^+$  and  $2^+$  states. This confirms the aligned/anti-aligned  $\nu(f_{5/2}^1 p_{1/2}^{-1})$  configuration of the  $3^+/2^+$  states as well as the  $f_{5/2}$  ground-state of  $^{55}\text{Ca}$ . Analysis of neutron evaporation channels has also provided evidence of an unbound state of  $^{54}\text{Ca}$  lying at  $\sim 4$  MeV, about 0.6 MeV above the neutron separation energy. This state has a similar energy as  $4^+$  states predicted from both effective interactions and those derived from ab-initio theories. A spectroscopic factor, derived from the GXPF1Br interaction, of  $\sim 1.25$  for the  $p_{3/2}$  orbital in the neutron-removal from  $^{55}\text{Ca}$  is suggestive of a significant population of an unbound  $4^+$  state at this energy. Regarding the one-proton-removal from  $^{55}\text{Sc}$ , the reac-

tion predominantly populates what is expected to be a  $3^-$  state which predominantly de-excites to the  $2^+$  state with a small branching to the  $3^+$  state. The reaction has a small branch to the direct population of the  $2^+$  state. It is anticipated that the parallel momentum distributions of the  $^{54}\text{Ca}$  in coincidence with the population of the ground-state will reflect an f-wave removal and the  $3^-$  state an s-wave. Equipped with the experimentally supported spin-parity values of the excited states, meaningful comparison can be made to theoretical predictions. A good agreement of levels is found with the GXPF1Br interaction, although the  $3^+$  and  $3^-$  states are predicted to be higher in energy. The positions of the  $2^+$  and  $3^+$  states are very well reproduced by calculations employing interactions derived from chiral EFT. It is noteworthy that the GXPF1Br interaction predicts an N=34 shell closure as robust as that of N=32, whilst the chiral EFT interactions predict a less robust N=34 closure. Recently, the robustness of the N=34 closure has been experimentally suggested to be greater than that of the N=32, providing an interesting conflict between the interactions that results of the current study shall be able to resolve.

#### ●Publications

Papers

Ha, J, Sumikama, T, Browne, F, et al.: Shape evolution of neutron-rich  $^{106, 108, 110}\text{Mo}$  isotopes in the triaxial degree of freedom, *Physical Review C*, 101, 044311 (2020).

#### ●Oral Presentations

## Conferences

Browne, F: Disentangling collective and single-particle structures in neutron-rich Se isotopes, High Resolution Gamma-Ray Spectroscopy at the RIBF, Darmstadt Germany, July (2019)

Browne, F: Coulomb excitation study of Se isotopes beyond N=50, 8<sup>th</sup> SUNFLOWER Workshop, Osaka Japan, August (2019)

Browne, F: Detailed level structure of the doubly magic <sup>54</sup>Ca from knockout reactions, International Nuclear Physics Conference, Glasgow UK, August (2019)

Browne, F: Detailed level structure of the doubly magic <sup>54</sup>Ca from knockout reactions, 14<sup>th</sup> Asia-Pacific

Physics Conference, Sarawak Malaysia, November (2019)

Browne, F: Exploring quadrupole and octupole collectivity beyond <sup>78</sup>Ni through B(E $\lambda$ ) measurements of <sup>84,86</sup>Ge and <sup>86,88,90</sup>Se, 20<sup>th</sup> RIBF NP-PAC Meeting, Wako Japan, December (2019)

## ●Poster Presentations

### Conferences

Browne, F: Probing the structure of the doubly magic <sup>54</sup>Ca with direct reactions, Gordon Research Conference on Nuclear Chemistry, New London USA, June (2019)

## XVII-013

### 冷却原子気体における強相関ボソン系の理論研究

#### Theoretical study of strongly correlated bosons in ultracold atomic gases

研究者氏名: 堀之内 裕理 Horinouchi, Yusuke

受入研究室: 創発物性科学研究センター

量子物性理論研究チーム

(所属長 古崎 昭)

本年度は、昨年度に引き続き、対称性に守られたトポロジカル相、及び関連分野として量子アノマリーの研究を行った。

前者に関しては、class AIIの電子系トポロジカル絶縁体を実験的に実現しているのに対し、ボソンのトポロジカル絶縁体の実現がされていないという状況に鑑みて、ボソンのトポロジカル絶縁体という量子相を示すような、厳密に解けるモデルを構成するという研究を行った。具体的には、まず代数トポロジーにおけるスペクトル系列の手法を用いて存在するトポロジカル絶縁体相を列挙し、スペクトル系列を物理的に解釈することで、三角格子上でボソンのトポロジカル絶縁体相を実現するモデルを構成した。また、構成したモデルを以下の二種類の方法で解析し、実際にボソンのトポロジカル絶縁体相を実現することを示した。一つは、系に磁場を挿入すると、系の端に Kramers doublet が出現するという非自明なトポロジカル応答を実証し、もう一つは系の端に対称性を破らないような局所的な摂動を与えても、端は gapless もしくは縮退のある基底状態になる (つまり量子アノマリーがある) ことを、解析的、及び数

値的に確かめた。

後者に関しては、Lieb-Schultz-Mattis の定理という、対称性に守られた弱いトポロジカル相の端に現れる量子アノマリーに関する研究を行った。具体的には、二次元のチェッカーボード格子上の半奇数スピンの系に並進対称性と U(1) 対称性と時間反転対称性があるとき、基底状態は必ず gapless もしくは縮退を示す、ということを示す、flux insertion という手法を用いて証明した。特に新奇的な点は、弱いトポロジカル相の端のアノマリーは、より低次元の情報で検知できるということを示す、一般コホモロジーの短完全列を用いて明確に議論した点、及び、まさにその低次元の情報を検知する flux insertion という手法を、チェッカーボード格子上に適用できるように、Klein bottle 型の境界条件を導入した点である。さらに、時間反転対称性がない磁化プラトーにも flux insertion を適用し、基底状態の縮退度の下限を見積もった。

## ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Shunsuke C. Furuya and Yusuke Horinouchi, “Translation constraints on quantum phases with twisted

boundary conditions”, Physical Review B 100, 174435 (2019).

**XVII-014 スピン偏極STM 発光分光法の開発及び二次元半導体における  
光スピン変換ダイナミクスの観測と制御**

**Development of spin-polarized STM luminescence spectroscopy and  
its application to investigation and control of photon-spin conversion dynamics  
in a two dimensional semiconducting material**

研究者氏名: 山本 駿玄 Yamamoto, Shunji

受入研究室: 開拓研究本部

Kim 表面界面科学研究室

(所属長 金有洙)

申請者の研究室では、主として極低温走査トンネル顕微鏡 (STM) を用いた研究を行っている。STMは、高い空間分解能を有するため、微小極限でのみ発現する物質の量子状態を可視化できる。そのため近年では、STMと光技術を融合させ、単原子・単分子で生じる量子ダイナミクスの追求を一貫して行ってきた。こうしたSTM研究において、トンネル電子の注入位置や注入エネルギーの制御のみならず、角運動量 (スピン, 軌道運動など) の制御まで実現可能となれば、量子ダイナミクスの制御性 (遷移選択則など) が飛躍的に向上し、研究舞台を大きく広げると期待される。そこで本研究課題では、STMにおいて角運動量の制御を可能とする“スピン偏極STM技術”の導入/確立および、それを用いたスピン-光変換における電子ダイナミクスの研究を、自律的に遂行してきた。

本年度は、スピン偏極STMを用いて半導体GaAsにスピン注入および、その応答として生じる光の偏極を (分光とともに) 測定する技術の確立を行った。こうした測定を行った結果、注入スピンの向きに応答してGaAs発光が偏極する様子の観測に成功し、GaAsにおけるスピン-光変換プロセスを明らかにした。この技術を更に発展させ、原子レベルでこの測定を実現することにより、GaAsにおけるスピン偏極電子の緩和ダイナミクスをバンド選択的に可視化することに成功した。また、ここで開発した偏光分光測定技術により、STM探針が発する光 (プラズ

モン発光) も高い偏極率を示すことが明らかとなった。これは、高い偏極率で偏光を発生させる基礎原理を解明した意義と同時に、(プラズモンが持つ光の増幅効果を考慮すると) 外部から導入する光の偏極率を増強して物質に伝える“レンズ”となる可能性も示唆している。さらに、プラズモン発光の偏極方向と注入スピンの向きに関して相関分析を行うことにより、両者に線形相関が存在する事を明らかにした。この関係は、従来の解釈では説明できないプラズモン偏光発光に関する新奇現象の存在を示しており、これまで観測し得なかった現象を、スピン偏極STM発光分光法により捉えることが可能になったといえる。

●**口頭発表 Oral Presentation**

山本駿玄, 今田裕, 金有洙: “スピン偏極STM発光分光法を用いた原子精度でのスピン注入と磁気二色性の観測”, 応用物理学会, 札幌市, Sep. (2019)

山本駿玄, 今田裕, 金有洙: “スピン偏極STM発光分光法を用いた原子精度でのスピン注入と磁気二色性の観測”, 日本物理学会, 岐阜市, Sep. (2019)

●**ポスター発表 Poster Presentation**

山本駿玄, 今田裕, 金有洙: “スピン偏極STM発光分光法を用いた原子精度でのスピン注入と磁気二色性の観測”, 日本物理学会, 福岡市, Mar. (2019)

研究者氏名: 山本 隆太 Ryuta Yamamoto

受入研究室: 創発物性科学研究センター

量子多体ダイナミクス研究ユニット

(所属長 福原 武)

幾何学的フラストラーションのあるスピン系では新奇的な磁気秩序相、例えば量子スピン液体や量子スピンアイスなど、の量子相が発現することが理論的に知られており、実験でも観測されるようになってきた。このような秩序相は物理的に非常に興味深いものだが体系的な理解をする上で依然として実験による検証が求められている。しかしながら、通常固体中では層間の相互作用などの効果を完全に排除することができず、理論検証が困難である。そのため、多くの場合において実験結果と理論との比較、検証の際には多くの近似や仮定を用いる必要がある。一方、レーザー光で再現した幾何学フラストラーションのある格子構造中にトラップした冷却原子を用いた場合、格子欠陥のない理想的な格子を構築することが可能なため、同一の実験系でありながらも種々のパラメータを容易に変更可能である。その結果、実験で得られた結果を用いて理論検証を容易に行うことができる。特に本研究では近年開発された光格子中のスピン分布の直接観測および操作する技術(量子気体顕微鏡)を活用することで、新奇的な磁気秩序相におけるスピン分布、さらには意図的に加えられた外乱によって引き起こされるスピン分布の時間発展ダイナミクスの観測が可能になると期待される。この観測結果から幾何学的フラストラーション系における新奇的な磁気秩序相の新たな知見を得ることができると考えられる。また、量子気体顕微鏡によるスピン分布の直接観測と空間光変調器を用いて構築可能な任意形状の光格子を組合せることで、様々な幾何学フラストラーションのあるスピン系に対する統一的な理解を得ることができると考えられる。

本年度は三角光格子に対する量子気体顕微鏡の構築に取り組んだ。まずラマンサイドバンド冷却、ラ

マン遷移を利用して光格子中にトラップされた原子の振動準位を一つ下げる、を用いて光格子中の原子をおおよそ基底状態まで冷却することに成功した。また単一原子観測のための蛍光観測時に起きる原子への加熱を抑えるため、ラマンサイドバンド冷却の種々のパラメータを機械学習を活用して最適化した。結果として7sという長寿命かつ高感度な蛍光観測を実現した。さらにスピン分布の直接観測に必須な高倍率かつ高分解能イメージングシステムの構築に取り組み、三角光格子の各格子点にトラップされた単一原子の観測に成功した。本研究の成果から近い将来に幾何学的フラストラーション系における新奇的な磁気秩序に対する新たな知見を得ることができると考えられる。

## ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Ippeei Nakamura, A. Kanemura, T. Nakaso, R. Yamamoto, T. Fukuhara: "Non-standard trajectories found by machine learning for evaporative cooling of  $^{87}\text{Rb}$  atoms", *Optics Express* 27 (15), 20435-20443 (2019)

## ●口頭発表 Oral Presentations

山本 隆太: "Quantum simulation with Quantum gas microscope", 第1回冷却原子研究会「アトムの会」(レクtoorレ熱海桃山), 9月(2019)

## ●ポスター発表 Poster Presentations

山本 隆太: "フラストレートスピン系の量子シミュレーターの開発", 第5回 理研-産総研 量子技術イノベーションコア Workshop, 秋葉原UDXシアター, 12月(2019)

## Noninvasive Synthetic Therapy: Organic Synthesis of Therapeutic Molecules within Living Systems

Name: Kenward VONG

Host Laboratory: Biofunctional Synthetic Chemistry Laboratory

RIKEN Cluster for Pioneering Research

Laboratory Head: Katsunori TANAKA

In the field of targeted drug delivery, the primary aim within the last few decades has been to establish mechanisms that can control and localize the release of bioactive drugs. Aside from the plethora of research focused on utilizing small molecule-based bioorthogonal reactions, there is increasing interest in exploiting the chemoselectivity and catalytic properties of abiotic transition metal catalysts. Unfortunately, efforts in this field are largely limited by two main factors: 1) the rapid quenching of metal catalysts by biological components, and 2) the limited number of water-compatible, metal-catalyzed, dissociative reactions. To combat this, the present study focuses on the development of biocompatible artificial metalloenzymes (ArM) designed for therapeutic applications. While exploring serum albumin-based ArMs, observations found that metal catalysts bound inside the hydrophobic binding pocket could be resistant to inactivation from biological thiols (i.e. glutathione). For the first part of this project, albumin-based ArMs were investigated for use in potential biological applications. In one case, investigations were conducted to develop an anticancer therapy that was used to successfully activate a drug precursor against various cancer lines (i.e. HeLa, A549, SW620) via ring-closing metathesis. In another case, albumin-based ArMs also displayed the viability to be adapted into turn-on fluorescent biosensors for the phytohormone ethylene gas. These probes were subsequently used to detect both exogenous- and endogenous-induced changes to ethylene biosynthesis in fruits and leaves. In the second part of this project, the focus has been on developing water-compatible metal-catalyzed reactions that can be adopted into ArMs for drug release strategies. With this goal in mind, a novel gold-triggered alkyne-based cyclization reaction was developed, which leads to the release of a secondary amine. Application of this reaction was then applied for the

controlled release of secondary amine-containing anti-cancer drugs (i.e. Endoxifen, Fluorouracil) tested against various cancer cell lines (i.e. HeLa, A549, PC3, MCF7). Overall, the results of this project should help to advance the future development of targeted drug release therapies within living biological systems.

### ●Publications

#### Papers

Vong K., Yamamoto T. and Tanaka K.: Artificial glycoproteins as a scaffold for targeted drug therapy. *Small*. 1906890 (2020).

Eda S., Nasibullin I., Vong K., Kudo N., Yoshida M., Kurbangalieva A. and Tanaka K.: Biocompatibility and therapeutic potential of glycosylated albumin artificial metalloenzymes. *Nat. Catal.*, 2, 780-792 (2019).\*

#### Review Articles

Vong K., Yamamoto T. and Tanaka K.: Artificial glycoproteins as a scaffold for targeted drug therapy. submitted \*

Tanaka K., Vong K.: Unlocking the therapeutic potential of artificial metalloenzymes. *Proc. Jpn. Acad. Ser. B*. 96, 79-94 (2020).

### ●Oral Presentations

#### Conferences

Vong K., Tanaka K.: "Investigation of biocompatible gold-catalysts for in vivo therapeutic applications" RIKEN-Max Planck Joint Research Center for System Chemical Biology the Seventh Symposium, Schloss Ringberg DE, Sept (2019)

Vong K., Tanaka K.: "生体内での細胞選択的治療を可能とする糖鎖付加人工金属酵素" 日本ケミカルバイオロジー学会 第14回年会, Nagoya JP, June (2019)

## ●Poster Presentations

Conferences

Vong K., Tanaka K.: “Gold-catalyzed 2-ethynylbenza-

mid cyclization for anticancer drug release” 第18回  
異分野交流の夕べ, 理化学研究所主催, Wako JP,  
March (2019)

## XVII-017 デジタル化分子構造の回帰分析による不斉触媒の最適形状探索

### Exploration of Optimal Shapes of Chiral Catalysts through Regression Analysis of Digitized Molecular Structures

研究者氏名: 山口 滋 Shigeru Yamaguchi

受入研究室: 環境資源科学研究センター

触媒・融合研究グループ

(所属長 袖岡 幹子)

不斉触媒反応は医薬品などファインケミカルの合成に必要不可欠である。不斉触媒反応開発は有機化学における重要な一分野となっている。不斉触媒開発の効率化を目指し、分子場解析と呼ばれる回帰手法を軸に、不斉触媒のデータ駆動型設計法を開発している。分子場解析とは触媒の3次元構造から計算した分子場と呼ばれる分子構造情報と、生成物の鏡像異性体比との間の回帰分析である。作成した回帰モデルの回帰係数をもとに触媒のどこが反応において重要かを可視化できる。可視化した重要構造情報をもとに触媒設計が簡単にできるようになれば、不斉触媒開発を格段に効率化できる。しかしこれまで、分子場解析により可視化した構造情報をもとにエナンチオ選択性が向上する分子設計に成功した例はなかった。分子場解析に基づく高性能触媒設計のための方法論構築を目指して研究を行なっている。これまでに所属研究室で開発されたパラジウム触媒によるβケトエステルの不斉フッ素化反応を解析対象として研究を行ない、データ駆動型不斉触媒設計法構築に直結する重要な成果を得ることに成功している。今年度は開発した手法をブラッシュアップしつつ、手法の有用性を実証するために広く共同研究を行なった。さまざまな不斉触媒反応の解析に本手法が利用可能であることが明らかになりつつある。また、これまで対象としていたエナンチオ選択性のみならず、位置選択性やジアステレオ選択性の精密制御を可能にするデータ駆動型触媒設計にも成功している。分子触媒におけるデータサイエンスの課題の一つとして、データ駆動による直接的かつ効率的な高性能触媒設計法の構築が挙げられる。基礎科学特

別研究員在籍期間でこの課題解決に大きく貢献し得る研究成果をあげることができた。今後も開発した手法を基盤に、有機合成効率化や、ひいては2015年に国連で採択されたSDGs(持続可能な開発目標)実現に資する革新的データ駆動型触媒設計法を構築していく。

## ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Yamaguchi S., Sodeoka M.: “Molecular Field Analysis Using Intermediates in Enantio-Determining Steps Can Extract Information for Data-Driven Molecular Design in Asymmetric Catalysis”, Bull. Chem. Soc. Jpn., 92, 1701-1706(2019)\*

(その他)

山口滋: “分子場解析に基づく不斉触媒反応におけるデータ駆動型分子設計法の構築”, 化学工業, 70, 845-850 (2019)

## ●口頭発表 Oral Presentations

(招待・依頼講演)

山口滋: “分子場解析に基づくデータ駆動型不斉触媒設計法の構築”, 「AIと有機合成化学」第4回公開講演会, 東京, 2月(2020)

## ●ポスター発表 Poster Presentations

Yamaguchi S., Sodeoka M.: “Data-Driven Molecular Design in Asymmetric Catalysis through Molecular Field Analysis”, OMCOS20, Heidelberg Germany, July(2019)

研究者氏名: 永澤生久子 Nagasawa, Ikuko

受入研究室: 環境資源科学研究センター

ケミカルバイオロジー研究グループ

(所属長 長田 裕之)

がんでは代謝機構のリプログラミングが生じており、がん細胞の生存及び増殖、浸潤、薬剤耐性、幹細胞性等に重要であることが知られている。そのことから、がん細胞において発現量や活性が変化している代謝酵素はがん治療標的分子として注目され、阻害剤開発が進められている。本研究ではこれまでに、理研 NPDepo 化合物ライブラリーより、大腸がん細胞の増殖を抑制する NPD10084 を見出してきた。その後、NPD10084 は解糖系の代謝酵素の一つである PKM2 の熱安定性を低下させることを発見し、PKM2 が NPD10084 の標的候補タンパク質として示唆された。PKM2 はがん細胞において発現が著しく亢進していることが知られ、長年その治療標的分子としての有用性が議論されている。今年度は、PKM2 に対する NPD10084 の作用メカニズムについてさらに解析を進めた。

昨年度までに、NPD10084 は PKM2 のピルビン酸キナーゼ活性に影響を与えないことを明らかにしていた。PKM2 は解糖系における機能の他に、細胞内の複数のタンパク質と相互作用して、それらの機能やシグナル伝達を制御することが知られている。そこで、NPD10084 が PKM2 のタンパク質間相互作用に与える影響について、免疫沈降法により検討した。その結果、NPD10084 は大腸がん細胞株において PKM2 と  $\beta$ -catenin、PKM2 と STAT3 の相互作用を阻害することを見出した。さらに、NPD10084 の処理により、PKM2- $\beta$ -catenin に転写制御される c-Myc 及び cyclin D1 の発現量が減少し、PKM2 の関与が報告されている STAT3 のリン酸化も抑制されることを見出した。次に、大腸がん細胞株に PKM2 を過剰発現させると、NPD10084 による PKM2 下流シグナルの抑制と細胞増殖阻害が部分的に回復することを明らかにした。このことから、NPD10084 は PKM2 への作用を介して細胞増殖阻害活性を示すことが示唆された。最後に、マウスゼノ

グラフトモデルを用いて NPD10084 の抗がん活性を評価した結果、NPD10084 投与群では腫瘍増殖の遅延が認められ、さらに腫瘍内 c-Myc 及び cyclin D1 の発現量の低下が認められた。このことから、NPD10084 は *in vivo* においても PKM2 の機能に作用することが示唆された。PKM2 のタンパク質間相互作用を標的とした化合物はこれまでに見出されていないことから、NPD10084 の発見は新規がん治療法の開発に重要な知見と考えられる。

#### ●誌上发表 Publications

Nagasawa I., Muroi M., Kawatani M., Ohishi T., Ohba S., Kawada M., Osada H.: "Identification of a small compound targeting PKM2-regulated signaling using 2D gel electrophoresis-based proteome-wide CETSA", *Cell Chemical Biology*, 27 1-11(2020)

#### ●口頭発表 Oral Presentation

Nagasawa I.: "Development of proteome-wide CETSA for target identification of bioactive small molecules", The 5th CSRS-ITbM Joint Workshop, Nagoya, Jan.(2019)

Muroi M., Nagasawa I., Ogawa N., Aono H., Futamura Y., Kawatani M., Osada H.: "Target identification of bioactive small molecules based on proteomic analyses using 2-D DIGE", RIKEN-Max Plank Joint Research Center for System Chemical Biology 7th Symposium, Schloss Ringberg, Kreuth, Germany, Sep.(2019)

室井 誠, 永澤 生久子, 二村 友史, 川谷 誠, 長田 裕之: "プロテオーム解析を応用した生理活性物質の標的特定法", 第10回発酵学フォーラム, 新潟, 2019年9月

#### ●ポスター発表 Poster Presentations



室井 誠, 二村 友史, 永澤 生久子, 川谷 誠, 青野 晴美, 小川 直子, 長田 裕之: “代謝作用化合物解析に向けたChemProteoBaseの高度化”, 新学術領域

研究 (研究領域提案型) 「化学コミュニケーションのフロンティア」第5回公開シンポジウム, 大阪, 2019年6月

**XVII-019 生体内合成化学治療：動物内における毒性分子アクロレインから  
薬理活性複素環化合物への変換**

**Therapeutic In Vivo Synthetic Chemistry: Transformation of Toxic Acrolein into  
Pharmacologically Active Heterocyclic Compounds in Live Animals**

研究者氏名: Ambara Rachmat PRADIPTA

受入研究室: 開拓研究本部

田中生体機能合成化学研究室  
(所属長 田中 克典)

A rapid and accurate intraoperative method to diagnose the presence of breast cancer on the edge of the surgically resected tissues, which can be performed directly in the operating room, is highly required. However, the current histological analysis method for determining surgical margins is time-consuming. Previously, we discovered 1,3-dipolar cycloaddition reaction between aryl azide and acrolein, which proceeds without a catalyst to give 4-formyl-1,2,3-triazoline derivative. The reaction proceeds with high reactivity and selectivity even under physiological conditions. We have successfully utilized the click reaction as a simple and robust method for detecting acrolein generated by live cells. Subsequently, we also reported that cancer cells produce a remarkable amount of acrolein, while healthy cells only release a negligible amount of acrolein.

Herein, we utilized the azide-acrolein click reaction-based method to discriminate breast cancer lesion from the normal breast gland, which resected from breast cancer patients. This method is the first example of the organic synthetic chemistry-based approach that not only able to visualize the cancer tissue but also able to distinguish morphology of the resected tissue only within few minutes and has potential clinical application for breast-conserving surgery. Moreover, we also show that cancer drug-conjugated aryl azide reacts selectively with acrolein, which released from cancer cells to deliver the drug only in the targeted area. The ability to perform chemical reactions with cancer metabolites at the cancer area and induce drug delivery at

the desired site is highly advantageous for cancer therapy.

●誌上发表 Publications

(原著論文)

1. Lodochnikova O. A., Chulakova D. R., Gerasimova D. P., Litvinov I. A., Pradipta A. R., Tanaka K. and Kurbangalieva A. R.: “Stereochemical features of the crystallization of eight-membered 1,5-diazaheterocycles with aminoindanol fragments at nitrogen atoms”, *J. Struct. Chem.*, doi: 10.26902/JSC\_id49649 (2020)\*
2. Chulakova D. R., Pradipta A. R., Lodochnikova O. A., Kuznetsov D. R., Bulygina K. S., Smirnov I. S., Usachev K. S., Latypova L. Z., Kurbangalieva A. R. and Tanaka K.: “Facile access to optically active 2,6-dialkyl-1,5-diazacyclooctanes”, *Chem. Asian. J.*, 14, 4048-4054 (2019)\*

(総説)

3. Pradipta A. R., Tanei T., Morimoto K., Shimazu K., Noguchi S. and Tanaka K.: “Emerging technologies for real-time intraoperative margin assessment in future breast-conserving surgery”, *Adv. Sci.*, 7, 1901519 (2020)\*
4. Chang, T. -C., Pradipta A. R. and Tanaka K.: “Enantioselective synthesis of cyclic and linear diamines by iminocycloaddition”, *Chirality*, doi: 10.1002/chir.23265 (2020)\*

## ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

1. Pradipta A. R., Ahmadi P., Fujii M. and Tanaka K.: “Reactivity of acrolein released from cancer cells: Application for selective cancer therapy”, 日本化学会第100春季年会, 東京理科大学野田キャンパス, 3月(2020)
2. Pradipta A. R.: “新規 UbTACs のためのリガンド化合物探索とキメラ化法開発”, 新学術領域「ケモユビキチン」第3回総括班会議, 南房総, 12月(2019)
3. Pradipta A. R., Tanaka K.: “Acrolein sensor for rapid intraoperative diagnosis of breast cancer”, Chemical Probe 第2回合同合宿セミナー, 嵐山町, 10月(2019)
4. Pradipta A. R., Fujii M. and Tanaka K.: “Synthetic

chemistry for clinical trials: Azide-acrolein click reaction for intraoperative diagnosis of breast cancer patient”, RIKEN-Max Planck Joint Research Center for Systems Chemical Biology the Seventh Symposium, Scholss Ringberg, Tagungshotel Der Max-Planck-Gesellschaft, Deutschland, 9月(2019)

## ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

1. Pradipta A. R.: “Acrolein click chemistry-mediated cancer diagnosis and therapy”, 令和元年度 基礎科学特別研究員成果発表会, 和光, 1月(2020)

## ●次の職 Next Career

Assistant Professor, Tokyo Institute of Technology  
Department of Chemical Science and Engineering

## XVII-020

### 皮膚表皮角質層バリア機能に関わる水分子の物性評価

#### Characterization of physical properties of water involved in barrier function of the stratum corneum in the skin epidermis

研究者氏名: 白神 慧一郎 Keiichiro Shiraga  
受入研究室: 生命医科学研究センター  
皮膚恒常性研究チーム  
(所属長 天谷 雅行)

水は生命活動に欠かすことのできない重要な物質であると広く信じられており、角質層内における水も皮膚疾患に関わる重要因子であると考えられる。しかし今日でも、水素結合を介して時間的・空間的に複雑な振る舞いを示す水の物性が生命活動とどのように関わっているかは明らかになっていない。そこで本研究では、水分子の水素結合ダイナミクスを直接的に観測できるミリ波・テラヘルツ波帯の分光情報に着目し、顆粒層SG1細胞が細胞死に移行する際に生じる細胞内水分子の物性変化を明らかにすることを旨とする。

ヒト血清アルブミン水溶液の誘電分光を10 MHz ~ 1 THzにわたる広帯域で実施し、デバイ緩和モデルを用いた最小二乗フィッティング解析を行った。その結果、ミリ波~テラヘルツ波に相当する周波数帯域では生体高分子(タンパク質)やその周囲を取り巻く水和水の寄与は無視できるほど小さく、溶質の影響を受けない水分子、すなわちバルク水の誘電

応答が支配的であることがわかった。そのため、数十GHz帯の周波数領域の誘電応答に基づくことで、細胞内に存在する水分子の性状(バルク水/水和水)を定量的に評価することができるとの着想に至った。65 GHz帯で動作するCMOS型近接アレイセンサはLC共振器を集積したICチップであり、チップ上に載せた測定試料の複素誘電率に応じて発振周波数が変化するという特性をもつ。すなわちこのセンサの発振周波数を通してバルク水の量や状態を選択的に観測することが可能であり、本研究では発振周波数の変化量をもとに測定試料のバルク水量と水和水量を一意的に求める手法を構築した。この近接アレイセンサを用いてマウス皮膚表皮から単離した顆粒層SG1細胞の経時変化測定を行ったところ、SG1細胞は細胞死を誘導された直後に細胞内の水和水量が2.9%だけ減少し、その後に細胞膜の破綻が始まることが見出された。この発見は、細胞の状態変化の過程で細胞内水の性状が変化していることを示す

初めての実験結果であり、SG1細胞では水の状態変化が引き金となって細胞死が進行している可能性を示唆している。

#### ●誌上発表 Publications

(総説)

白神慧一郎：“テラヘルツ帯における水のスペクトル解析”，月刊OPTRONICS, 5 84-88 (2019)

小川雄一, 白神慧一郎：“テラヘルツ分光法による細胞内水分子ダイナミクスの評価”，光学, 48 419-424 (2019)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

Shiraga, K.: “Characterization of intracellular water involved in physiological changes of cells”, RIKEN Interdisciplinary Exchange Evening in Yokohama, Yokohama, Nov. (2019)

白神慧一郎, 小川雄一：“テラヘルツ分光を用いた細胞内水和状態の評価”，生細胞分光部会シンポジウム, 筑波, 12月 (2019)

### XVII-021 糸状菌の病原性を指標にした「獲得形質の遺伝」メカニズムの解明

#### The Mechanism of the Acquired Traits Inheritance in Plant Pathogenic Fungi

研究者氏名: 熊倉直祐 Kumakura, Naoyoshi

受入研究室: 環境資源科学研究センター

植物免疫研究グループ

(所属長 白須賢)

生物は日々変化する環境に適応し、時にその適応した性質を次世代に伝える。この現象は「獲得形質の遺伝」としてラット・ヒト・線虫など複数の生物種で報告され、生命が持つ重要な性質であることが認識されつつあるにも関わらず、その分子メカニズムはほとんど明らかとなっていない。本研究課題では「獲得形質の遺伝」の分子メカニズム研究に適した生物として、糸状菌に着目した。作物に感染する病原性糸状菌は培地上での育成を数ヶ月続けると病原性が低下し、この性質は世代交代を経て維持される。しかしながら、病原性が低下した糸状菌であっても植物に感染させると高い病原性が回復し、その性質も数世代にわたり維持される。この現象は病原性の強弱という一世代で得た「獲得形質」が何らかのメカニズムで遺伝することを示す。このメカニズムとしてエピジェネティックな遺伝子発現制御が疑われるものの、ゲノム情報の不足によりその解析は困難であった。本研究課題ではこれまでに得てきた病原性糸状菌のゲノム情報、分子遺伝学的な解析に不可欠な形質転換技術を駆使し、病原性糸状菌の「獲得形質の遺伝」メカニズムを分子レベルで解明する。そのため、本年度は病原性の変化の指標となる炭疽病菌の病原性遺伝子の同定を目標とし、以下の結果が得られた。

- モデル炭疽病菌であるウリ類炭疽病菌において、相同組み換え時にCRISPR/CAS9システムを導入し、遺伝子破壊効率を20倍程度まで向上させることに成功した。
- CRISPR/CAS9による遺伝子組み換え効率向上により、相同組み換えに用いるDonor DNAとして、大量生成したPlasmidから、より少量のPCR断片への変更が可能になり、コンストラクションに要する時間が短縮した。
- マーカーリサイクリング法・CRISPR/CAS9システムを用い、ウリ類炭疽病菌の病原性に寄与することが予想される二次代謝産物合成酵素をコードする遺伝子の多重破壊株を作成し、植物上での表現型を観察した。その結果、ポリケチド合成酵素PKS13が病原性に寄与することが明らかになった。
- PKS13は炭疽病菌種で広く保存され、ゲノム上で二次代謝物の修飾酵素・トランスポーター・転写因子など10個の遺伝子からなるクラスターを形成していた。

#### ●誌上発表 Publications

(総説)

Tsushima A., Gan P., Kumakura N., Narusaka M., Takano Y., Narusaka Y., Shirasu K.: “Genomic Plas-

ticity Mediated by Transposable Elements in the Plant Pathogenic Fungus *Colletotrichum higginsianum*”, *Genome Biology and Evolution*, 11(5), (2019)\*

●ポスター発表 Poster Presentations

Kumakura N., Singkaravanit-Ogawa S., Gan P., Tsuchishima A., Narusaka M., Narusaka Y., Takano Y., Shirasu K.: “*Colletotrichum* ribonuclease-type virulence effectors potentiate host immune responses”, IS-MPMI XVIII Congress, Glasgow, UK, July (2019)

XVII-022

哺乳類卵母細胞の大きな細胞質の意義

The functional significance of large cytoplasmic volume in mammalian oocytes

研究者氏名: 京極 博久 Hirohisa Kyogoku  
受入研究室: 生命機能科学研究センター  
染色体分配研究チーム  
(所属長 北島 智也)

卵母細胞の第一減数分裂では、染色体分配異常が起こりやすいことが知られている。染色体分配は、主に微小管によって構成された、紡錘体とよばれる細胞内構造体により行われる。これまでの研究より、卵母細胞の細胞質量によって大きなサイズにスケールリングされた大きな紡錘体は、安定性が低下しており染色体の赤道面への整列異常が増加することにより染色体分配異常を引き起こすこと、その機能性の変化は、微小管の安定性の変化に起因することが明らかとなった。しかし、どのように細胞質サイズが紡錘体の安定性に影響を与えているのかは分かっていない。本研究では、紡錘体を主に構成する微小管に着目して、紡錘体の安定性が変化する原因を、ライブイメージングと顕微操作技術を組み合わせて直接的に明らかにすることを目的とした。

本年度は、マイクロマニピュレーション技術と質量分析 (Mass-Spec) を用いて、微小管安定因子のスクリーニングを行い、微小管の安定性を変化させる分子メカニズムの解明を行った。さらに、これまでの研究により、染色体分配に関しては、細胞質が小さい方が有利であることが示唆されている。では、なぜ卵母細胞は、大きな細胞質を持っているのでしょうか？胚の発生能力を上げるために大きな細胞質が必要であることは、よく知られている。しかし、具体的にどの過程において細胞質が大きい方が有利なのかは分かっていない。そこで、卵母細胞が大きな細胞質を持つメリットの解明を行った。

(1) 微小管安定性の変化が、核/細胞質比 (N/C

Ratio) の変化によっておこることに着目し、マイクロマニピュレーション技術を用いて核と細胞質を単離し、質量分析にかけることで、微小管安定化因子のスクリーニングを行った。その結果、いくつかの候補因子が発見された。

(2) 候補因子を卵母細胞に過剰発現することで微小管の安定性が変化するかを解析した。その結果、今回特定した微小管安定化因子は卵母細胞において微小管の安定性を向上させることが明らかとなった。

(3) 特定した微小管安定化因子の分子メカニズムの解明を行った。特定した分子の変異体を作成し卵母細胞に発現させることで機能が変化するかを調べた。その結果、核への局在が重要な役割を持つことが明らかとなった。

(4) 受精時の細胞質サイズの影響を明らかにした。マイクロマニピュレーション技術を用いて細胞質量を半分 (Half) と2倍 (Giant) にした卵母細胞を作成し、受精から前核形成までをライブセルイメージング技術を用いて解析した。その結果、細胞質サイズが小さいと極体放出に失敗し正常な発生ができないことが明らかとなった。

●口頭発表 Oral Presentations

京極博久, 北島智也: “Cytoplasmic size modulates kinetochore-microtubule stability in early embryonic development”, 第2回新学術領域研究「配偶子インテグリティの構築」, 福岡, 7月 (2019)

●ポスター発表 Poster Presentations

京極博久, 北島智也: “卵母細胞の大きな細胞質が発

生に及ぼす影響”, 第112回 日本繁殖生物学会, 北海道, 9月 (2019)

**XVII-023 動物細胞の運命決定の変化に伴う細胞内代謝の変動の普遍的原理の解明**

**Revealing Fundamental Rules of the Intracellular Metabolic Changes During Cell Fate Change.**

研究者氏名: 柳沼 秀幸 Yaginuma Hideyuki

受入研究室: 生命機能科学研究センター

細胞極性統御研究チーム

(所属長 岡田 康志)

細胞内のエネルギー通貨として重要な小分子、アデノシン三リン酸 (ATP) の濃度は、細胞の分化状態や健康状態に応じて変化することが示唆されている。本研究は、私が開発したATPセンサータンパク質QUEENを用いて細胞内の絶対ATP濃度を解析し、細胞の運命決定との関連を明らかにしたいというものである。本年度は最終年度であるので、ATP濃度が細胞の運命決定に与える影響の一端を解明しようと試みた。

MDCK細胞が分裂して、単一細胞から成るシート構造を作る様子の解析を行なった。腎臓由来の細胞であるMDCKは、ディッシュ上で培養する際に細胞密度が上がってくると、細胞間の接着が強固になるとともに、細胞体の上側(培地側)から下側(ディッシュ表面側)に物質を輸送するようになる性質がある。この際に、細胞の形態が平たく広がった形から縦長の形に変化するなど、見た目には大きな変化がある。一方、定期的に植え替えを繰り返してずっと低い細胞密度を維持したままMDCK細胞を培養した際にはそのような形態変化は起こらない。このような運命の変化の際に細胞内で起きている変化を解析した。予備的な結果は以前にも得ており、運命状態の変化の際に代謝状態が大きく多様化することがわかっていた。最近ではこれに加えて、代謝阻害剤に対する応答を単一細胞レベルで観察するのみならず、統計学的な客観的解析手法を開発して細胞の位置と代謝状態についてより高度な解析を行なうことにした。その結果、細胞の代謝状態は、他の細胞との位置関係によって強く影響されることがわかった。

続いて、マウス由来のES細胞を用いて、隣接する細胞間で代謝の状態が相関するかどうかを調べ

た。ES細胞は未分化条件で培養していても、細胞ごとに状態は一様ではなく、ある程度の幅を持って状態が分布している。ES細胞のATP濃度を定量したところ、やはり細胞同士の位置は細胞内ATP濃度に影響を及ぼすことがわかった。

これらの結果は、細胞の位置が代謝状態の決定に重要であることを示唆する。生体内で臓器の正常な発達・分化を行うにあたって細胞同士の位置関係が重要であることは容易に予想がつく。詳細な分子的メカニズムの解明にはさらなる研究が必要であるが、今回の研究計画で目指した細胞の運命決定機構の一端を担う重要な未発見現象を、新技術を用いて発見することが出来たと考えている。

●招待講演 Invited talk

(学会)

柳沼秀幸, 岡田康志: “細胞のエネルギー状態の定量的単一細胞解析を可能にするATPセンサー蛍光タンパク質 ‘QUEEN’, 第19回日本蛋白質科学会年会 第71回日本細胞生物学会大会 合同年次大会, 神戸, 6月24日 (2019)

柳沼秀幸, 岡田康志: “定量的ATPイメージングを用いた細胞の代謝状態の空間的相関の解析”, 第57回日本生物物理学会年会, 宮崎, 9月24日 (2019)

●受賞 Award

日本細胞生物学会第71回大会 若手優秀発表賞 (2019年6月)

第57回日本生物物理学会年会 若手奨励賞 (2019年9月)

## XVII-024      **Engineering synthetic biology tools to aid single-cell and ‘omics’ techniques for studying RNA localization and local translation**

Name: Callum John Christopher PARR

Host Laboratory: Laboratory for Advanced Genomics Circuit,  
RIKEN Center for Integrative Medical Sciences (IMS)  
Laboratory Head: Jay SHIN

One possible means to regulate the biogenesis, including localization of RNA is through base and sugar modifications in the RNA molecule. However, current methods to determine such ‘epitranscriptomic’ signatures are in their infancy and suffer three major limitations: (i) over reliance on antibody enrichment which still requires very deep-sequencing (ii) inherent non-specific pull down through antibody-epitope interactions, and (iii) can only discover one particular chemical modification at a time. Additionally, using NGS data we can only form correlative conclusions between a particular RNA modification and biological consequence on the RNA molecule. This is further complicated that many different modifications may exist on the same RNA molecule, leading to synergies, potentiation, and attenuations.

The first set of problems may be resolved through the newest generation of commercial sequencers that measure ionic current within a protein pore as a molecule passes through it. Deep neural networks can be trained to decipher from this raw signal, the sequence of standard ribonucleotides (uridine, cytidine, adenosine, and guanosine) as it passes through the pore. Modifications of standard ribonucleotides may also be hidden within this raw signal and teased out using further training sets. As it is single-molecule sensing, we can have true quantitative and stoichiometric measurements of population of RNA molecules. We will now begin to test the discovery of base-analogs, 4-thiouracil, and 5-ethynyluridine, and natural occurring modified bases such as pseudouridine ( $\Psi$ ) and  $N^1$ -methylpseudouridine ( $1m\Psi$ ) using nanopore sequencing on synthetic RNA molecules versus unmodified synthetic

molecules before moving to cell-based systems.

Initially using a select number of training sequences, paired samples with completely unmodified RNA or where every uridine was modified was used to train a classifier for the particular modification using a recurrent neural network. This builds on top of the standard model used for basecalling native RNA raw signal as so can discern between native ribonucleotides as well as the modification being tested. In addition to calling modified bases this also improved the overall percent identity to the reference (70% to ~98% modal percent identity). However outside of the limited context it performed badly on endogenous RNA. To this end an artificial cDNA library was generated from human, mouse, and yeast total RNA populations with the addition of T7 polymerase promoter added at the 5’ end so as to permit the *in vitro* transcription from this dsDNA template pool. Furthermore a more realistic substitution rate of 30% modified was used for training. To identify which positions are modified for creation of ground truth reference data set we used statistical modelling to identify raw signals inconsistent with canonical bases. Models trained on data generated with 5-EU- or  $1m\Psi$ -modified RNA allowed for nucleotide resolution identification of these modifications on test data and increase percent identity to ~96% from ~94%. Now we are assessing the accuracy of the models using various experimental and statistical methods. Ultimately we wish to apply these models to detect modifications in endogenous RNA from various subcellular compartments and detection of base-analogs in metabolic labeling experiments.

A Study of the Coordination Dynamics between Cell Division and Differentiation by  
Combination of Imaging and Digital RNA Sequencing for Single Cells

研究者氏名: 小川 泰策 Taisaku Ogawa

受入研究室: 生命機能科学研究センター

細胞システム動態予測研究ユニット

(所属長 城口 克之)

本研究目的は、細胞の分裂・分化過程における全遺伝子発現変動を1細胞レベルで解析し、分裂と分化の関連機構を明らかにすることである。そのためには、単一細胞の顕微鏡画像（または動画）と全遺伝子発現（RNA-seq）を同時計測し、得られた大量のデータセットを機械（コンピューター）に学習させ、単一細胞の顕微鏡画像からその細胞内の全遺伝子発現を高精度に予測するための実験・解析プラットフォームを開発する必要がある。その技術を用いて、細胞（おもに造血系）の分裂・分化を長時間記録したタイムラプス動画の全フレーム・全細胞に対して、全遺伝子発現を割り当てる（予測する）ことを可能にし、本研究目的を達成させる。

本年度は、以下の項目に取り組んだ。

(1) 顕微鏡でイメージングした個々の細胞をシーケンシングするための実験自動化プラットフォームの開発

本実験プラットフォームは、(i) 顕微鏡で観察した単一細胞を全自動でピックアップし、高速にPCRプレートに分取するロボットシステム（特許出願完了）と、(ii) 分取した単一細胞内のRNAをシーケンシングするための自動シーケンスライブラリー調整システムという2つの自動化システムから構成されている。これを用いることで、約1,000細胞の（明視野及び多色蛍光）顕微鏡画像+RNA-seqのデータセットを10日間で取得することが可能である。さらに、動画を撮影した上で細胞をピックアップすることで、細胞の動態（走化性、形態変化等）や、別の細胞と相互作用している細胞とその瞬間の全遺伝子発現を結び付けることも可能である。また、本実験プラットフォームは非常に柔軟性が高く、共焦点顕微鏡や超解像顕微鏡等の他の顕微鏡システムの導入や、他のオミックス解析プラットフォームの導入も可能である。本実験プラットフォームに関する成果は現在論文投稿準備中であ

る。すでに理研内外から評価を受け、共同研究を複数進行中である。

(2) 機械学習を用いた画像解析による細胞の分化状態を判別する解析手法の開発

非染色顕微鏡画像（明視野、位相差、微分干渉等）から、造血系細胞の分化状態を機械に判別させる解析手法を開発した（共同研究）。異なる分化状態の細胞画像を数万個ずつ取得し、それらを判別できるような機械学習モデルを構築することで、90%に近い精度で分化状態を判別することに成功した。これに関する成果も論文投稿準備中である。この解析技術においても、理研内外から評価を受け共同研究を複数進行中である。

●誌上発表 Publications

(原著論文)

Yazaki, J., Kawashima, Y., Ogawa, T., Kobayashi, A., Okoshi, M., Watanabe, T., Yoshida, S., Kii, I., Egami, S., Amagai, M., Hosoya, T., Shiroguchi, K., Ohara, O. “HaloTag-based conjugation of proteins to barcoding-oligonucleotides” *Nucleic Acids Res.* 48, 2, e8, (2019)

●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

Ogawa, T. and Shiroguchi, K. “An automated system for combining single-cell RNA-seq with live cell imaging and its applications for Singularity Biology”, The 57<sup>th</sup> Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Miyazaki, Japan, Sep. (2019)

●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

Ogawa, T. and Shiroguchi, K. “Development of an automated system to take datasets of images and se-

XVII-026

単一細胞DNA複製タイミング解析によるマウス胚発生初期の  
三次元ゲノム構造の推定

Prediction of the 3D Genome Organization During Early Mouse  
Embryogenesis by Single-Cell Replication Timing Profiling

研究者氏名: 高橋 沙央里 Saori Takahashi

受入研究室: 生命機能科学研究センター

発生エピジェネティクス研究チーム

(所属長 平谷 伊智朗)

マウスの初期胚発生過程において、核内の三次元ゲノム構造は大きく変化する。近年のHi-C法による三次元ゲノム構造解析から、間期細胞核の中で、各々の染色体は100万塩基対ほどの球状に折り畳まれたトポロジカルドメイン (Topologically Associating Domain; TAD) が数珠つながりになった構造をとり、TADはさらに折り畳まれて転写活性の高いAコンパートメント、もしくは転写活性の低いBコンパートメントと呼ばれる領域を核内空間に形成することが明らかになってきた。しかし、Hi-C法によるA/Bコンパートメント分布を単一細胞から算出することは依然として難しい。一方、我々は、DNA複製タイミング解析の結果がHi-C法から得られたA/Bコンパートメント分布と極めて似ていることを見出していた。これは、DNA複製タイミング解析によって核内コンパートメントA/Bの分布が推定できることを示唆していた。そこで、本研究では単一細胞レベルのゲノムワイドDNA複製タイミング解析の実験系を確立し、マウス初期胚で解析を行い、初期胚細胞分化に伴う核内コンパートメント分布の変化を推定することを目的とした。

初期胚での解析に先立ち、昨年度までに私は、分化前後のマウスES細胞を用いて単一細胞ゲノムワイドDNA複製タイミング解析法scRepli-seq (single-cell DNA replication sequencing method) を確立した。分化前後のマウスES細胞のscRepli-seqでは、DNA複製プロファイルは細胞間で極めて均一であることや、細胞間の複製のゆらぎが比較的大きいゲノム領域の特徴などを明らかにした。今年度は、着床前胚を用いたscRepli-seqの実験条件検討を行い、4細胞期胚の複製プロファイルを得た。大部分の領域はES細胞と似た複製プロファイルであったが、

一部でES細胞と4細胞期胚で異なるプロファイルを示す領域も観察でき、これらの領域は核内コンパートメント分布も異なることが示唆された。現在は、初期胚細胞分化とそれに伴う複製プロファイル変化を解析するために、同一細胞からのscRepli-seqとscRNA-seqを試みている。これにより、初期胚発生期における最初の分化がいつ起こり、その時の複製プロファイル変化、言い換えると核内コンパートメント変化がどのように起きるのかを明らかにしたい。

●誌上发表 Publications

(原著論文)

Miura H., Takahashi S., Poonperm R., Tanigawa A., Takebayashi S-i. and Hiratani I.: “Single-cell DNA replication profiling identifies spatiotemporal developmental dynamics of chromosome organization”, Nature Genetics, 51(9):1356-1368 (2019)\*

(総説)

Hiratani I. and Takahashi S.: “DNA Replication Timing Enters the Single-Cell Era”, Genes, 10 (3) (2019)\*

●口頭発表 Oral Presentations

Takahashi S., Miura H., Shibata T., Nagao K., Obuse C., Takebayashi S-i. and Hiratani I.: “Single-cell DNA replication sequencing and its application to studies of early mouse embryonic development”, 第13回日本エピジェネティクス研究会年会, 横浜, 5月 (2019)

高橋沙央里, 三浦尚, 柴田隆豊, 長尾恒治, 小布施力史, 竹林慎一郎, 平谷伊智朗.: “1細胞解析で明らかにされたDNA複製ドメインの細胞間の安定性と不均一性”, 第19回日本蛋白質科学会年会・



第71回日本細胞生物学会大会合同年次大会, 神戸, 6月(2019)

高橋沙央里, 三浦尚, 柴田隆豊, 長尾恒治, 小布施力史, 竹林慎一郎, 平谷伊智朗.: “マウスES細胞分化および初期胚発生過程における1細胞全ゲノムDNA複製タイミング解析”, 第42回日本分子生物学会年会, 博多, 12月(2019)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

Takahashi S., Miura H., Shibata T., Nagao K., Obuse C., Takebayashi S-i. and Hiratani I.: “Single-cell DNA replication sequencing and its application to studies of early mouse embryonic development”, 第13回日本エピジェネティクス研究会年会, 横浜, 5月(2019)

XVII-027

### 近交系マウスの表現型および遺伝子型解析を用いた能動的低代謝メカニズムの解明

#### Discovering of the Mechanism of Active Hypometabolism Through Genetic and Phenotypic Analysis of Inbred Mouse Strains

研究者氏名: 砂川玄志郎 Sunagawa, Genshiro  
受入研究室: 生命機能科学研究センター  
網膜再生医療研究開発プロジェクト  
(所属長 西田 栄介)

本研究は哺乳類の有する能動的低代謝能(冬眠や休眠)を臨床応用することを目指し、マウスの休眠現象をモデルとして、低代謝の原理を明らかにしようとしている。このため、①個体の高速かつ簡便な代謝表現型解析を開発し②休眠表現型の異なる近交系を交配させた個体の表現型と遺伝子型の関連性をみることで低代謝関連遺伝子を同定することを計画してきた。本年度は、B6J以外の近交系の休眠表現型にて、B6Jとは異なる休眠表現型を呈するマウス近交系を複数同定し、これらの動物からES細胞を樹立し、細胞レベルでも近交系の代謝表現型が異なることを明らかにした。さらに、マウスの能動的低代謝の中核制御を明らかにするために、視床下部を介した休眠制御の機構を明らかにした。来年度以降も多角的に能動的低代謝の原理に迫りつつ人工冬眠を臨床応用できるよう研究を進めたい。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Takahashi TM, Sunagawa GA<sup>#</sup>, Soya S, Abe M, Sakurai K, Ishikawa K, Yanagisawa M, Hama H, Hasegawa E, Miyawaki A, Sakimura K, Takahashi M, Sakurai T<sup>#</sup>: “A Novel Neuronal Circuit that induces Hibernation-like State in Mice.”, *Nature*, 583, 109–114, 2020. (<sup>#</sup> Corresponding authors)

(総説)

砂川玄志郎, “睡眠と冬眠と代謝”, 睡眠医療, 13, 137-141 (2019)

#### ●口頭発表 Oral Presentations

Genshiro A. Sunagawa, “マウス日内休眠を能動的低代謝のモデルとして用いる: 休眠中マウスの骨格筋トランスクリプトーム解析”, 第97回日本生理学会大会, Beppu, Japan, Mar. (2020) 予定

Genshiro A. Sunagawa, “Toward clinical application of torpor: active hypometabolism research in mice”, 第93回日本薬理学会年会, Yokohama, Japan, Mar. (2020) 予定

Genshiro A. Sunagawa, “冬眠の臨床応用に向けて: マウスを使った能動的低代謝の研究”, 名古屋リズム研究会2020, Nagoya, Japan, Mar. (2020) 予定

Genshiro A. Sunagawa, “冬眠のひみつ”, 文部科学省 新学術領域研究「温度生物学」市民公開講座, Tokyo, Japan, Dec. (2019)

Genshiro A. Sunagawa, “マウスを用いた人工冬眠の研究”, 第63回 宇宙科学技術連合講演会, Tokushima, Japan, Nov. (2019)

Genshiro A. Sunagawa, “Daily torpor in mice as a model of active hypometabolism in mammals”, NEURO2019, Niigata, Japan, Jul. (2019)

Genshiro A. Sunagawa, “マウス休眠をモデルとした

能動的低代謝の研究：骨格筋における休眠特異的遺伝子発現の解析”，第3回冬眠休眠研究会，Kobe, Japan, Jul. (2019)

Genshiro A. Sunagawa, “マウスの日内休眠における骨格筋の遺伝子発現の変化”，第22回日本脳低温療法・体温管理学会学術集会，Tokyo, Japan, Jul. (2019)

Genshiro A. Sunagawa, “冬眠の臨床応用に向けて：能動的低代謝を体温管理療法に応用できるか？”，

第22回日本脳低温療法・体温管理学会学術集会，Tokyo, Japan, Jul. (2019)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

Genshiro A. Sunagawa, “Induction of Hibernation-like State in Mice: A Novel Neuronal Circuit of Regulated Hypometabolism”, RIKEN BDR Symposium 2020, Kobe, Japan, Mar. (2020) 予定

### XVII-028 新規スフィンゴ脂質の代謝機構および精神疾患メカニズムとの関連解明

#### Biochemical Dissection of Novel Sphingolipids in the Pathophysiology of Psychiatric Illnesses

研究者氏名：江崎加代子 Kayoko Esaki  
受入研究室：脳神経科学研究センター  
分子精神遺伝研究チーム  
(所属長 吉川 武男)

統合失調症は、人口の約1%が発症する重篤な精神疾患であるにも関わらず、既存の治療法では十分な効果を発揮できないことも多く、アカデミアからの新規パラダイムの提案が切に求められている。統合失調症は、病理所見の1つとして白質の走行・機能異常があげられており、近年複数の臨床研究よりスフィンゴ脂質が疾患病理に関連する因子として報告されている。スフィンゴ脂質は、中枢神経系に豊富に含まれ、細胞増殖やアポトーシスなど様々な細胞機能の制御に関与しており、中枢神経系では神経伝達物質グルタミン酸の放出や神経細胞の突起伸長、ミエリン形成などに関与することが報告されている。

我々はスフィンゴ脂質が精神疾患の発症・進行などの病態に関与するメカニズムを明らかにするため、まず、統合失調症、双極性障害、うつ病患者とその対照群の脳梁（白質）とBrodmann Area 8（前頭葉、灰白質）の死後脳サンプルを用いてスフィンゴ脂質を抽出後、LC/ESI-MS/MSによって分析した。その結果、統合失調症患者の脳梁において疾患特異的、部位特異的に一部のスフィンゴ脂質含量が低下していた。また、脳梁中のスフィンゴ脂質含量と統合失調症患者の各種交絡因子（死後脳のpH、患者の年齢、死後経過時間、病気の期間、および服薬量）の相関解析、および野生型マウスを用いた向

精神病薬長期投与による脳梁スフィンゴ脂質含量変化の解析の結果、統合失調症患者の脳梁中スフィンゴ脂質含量の低下は服薬量の影響ではない可能性が示唆された。さらに、統合失調症患者脳梁におけるスフィンゴ脂質代謝酵素の遺伝子発現変化を解析したところ、スフィンゴ脂質分解酵素の遺伝子発現が上昇していた。このことから、統合失調症患者でスフィンゴ脂質の分解が亢進している可能性が示唆された。さらに、統合失調症患者脳梁でスフィンゴ脂質受容体遺伝子の発現が上昇していた。スフィンゴ脂質シグナル経路は神経細胞の突起伸長やミエリン形成に関与することから、統合失調症患者脳梁においてスフィンゴ脂質の代謝変化によって神経機能制御に異常が起こり、精神疾患発症脆弱性につながった可能性が示唆された。

#### ●口頭発表 Oral Presentations

Kayoko E.: “Dysregulation of sphingolipid-signaling pathway in the corpus callosum from schizophrenia postmortem brain” 6th Congress of AsCNP, Fukuoka, Oct. (2019)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

江崎加代子，渡辺明子，岩山佳美，島本知英，大羽尚子，平林義雄，Brian Dean，吉川武男：“統合失

調症患者死後脳におけるスフィンゴ脂質代謝変化とスフィンゴ脂質シグナル経路の病態メカニズムへの関与の解析” 第14回日本統合失調症学会, 北海道札幌市, 4月 (2019)

江崎加代子, 吉川武男: “統合失調症患者死後脳で見られるスフィンゴ脂質代謝異常” 第115回日本精神神経学会学術総会, 新潟県新潟市, 6月 (2019)

江崎加代子, 渡邊明子, 岩山佳美, 島本知英, 大羽尚子, 平林義雄, Brian Dean, 吉川武男: “ヒト死

後脳を用いたスフィンゴ脂質代謝変化を伴う統合失調症病態メカニズムの分子機序の解明” 第41回日本生物学的精神医学会, 新潟県新潟市, 6月 (2019)

江崎加代子, 渡邊明子, 岩山佳美, 島本知英, 大羽尚子, 平林義雄, Brian Dean, 吉川武男: “精神疾患病態メカニズムへのスフィンゴ脂質代謝の関与の解明” 第92回日本生化学会大会, 神奈川県横浜市, 9月 (2019)

## XVII-029                      Endogenization and excision of human herpesvirus 6 in human genomes

Name: Xiaoxi LIU

Host Laboratory: Genome Immunobiology

RIKEN Hakubi Research Team,

RIKEN Center for Integrative Medical Sciences

Laboratory Head: Nicholas PARRISH

The genome of human herpesvirus 6 (HHV-6) is integrated within the nuclear genome of about 1% of the human population, but how this came about is not known. Integration of HHV-6 occurs into the telomere and has recently been associated with polymorphisms affecting *MOV10L1*. *MOV10L1* is located on the sub-telomere of chromosome 22q (chr22q) and is required to generate PIWI-interacting RNAs (piRNAs), which silence foreign genetic elements in the germline. Reactivation of integrated HHV-6 into an infectious virus is also unclear. In vitro, recombination of the full-length viral genome along the terminal direct repeats (DRs) leads to viral excision from the telomere and reactivation, but the expected single DR “scar” has not been described in vivo. We analyzed whole-genome sequencing data from 13,040 subjects, including 7,485 from Japan. We found an association between integrated HHV-6 and polymorphisms on chr22q in Japanese subjects. However, association with the reported *MOV10L1* polymorphism was driven by physical linkage to a single ancient endogenous HHV-6A variant integrated into the telomere of chr22q in East Asians. We resolved the junction of the human chromosome with this viral genome using long read sequencing. Unexpectedly, an HHV-6B variant has also endogenized

in chr22q; two endogenous HHV-6 variants at the same locus thus account for 72% of all integrated HHV-6 in Japan. We also report subjects who carry only one portion of the HHV-6B genome, a single DR, supporting in vivo excision and viral reactivation. Using WGS data from North American families, we show that the incidence of HHV-6 integration into the germline is lower than its prevalence, and that integrated HHV-6 is not associated with the reported variant in *MOV10L1*. Together these results explain the recently reported association between integrated HHV-6 and *MOV10L1*/piRNAs, suggest exaptation of HHV-6 in its coevolution with human chr22q, and clarify the evolution and risk of reactivation of the only intact non-retroviral genome known to be present in human germlines.

### ●Publications

Papers

Xiaoxi Liu et al., Prevalence and spectrum of pathogenic germline variants in Japanese patients with early-onset colorectal, breast, and prostate cancer, *JCO Precision Oncology*, 2020 (In press)

### ●Oral Presentations

Xiaoxi Liu et al., Recurrent endogenization of human

herpesvirus 6 on chromosome 22q in East Asians,  
the 11<sup>th</sup> INTERNATIONAL CONFERENCE ON  
HHV-6 & 7, Quebec, Canada

Xiaoxi Liu et al., Identification of chromosomal inte-  
gration site of human herpesvirus 6 (HHV-6) by  
Nanopore long-read sequencing, the 42rd Annual  
Meeting of the Molecular Biology Society of Japan,  
Fukuoka, Japan

●Poster Presentations

**XVII-030 仮想空間を用いたゼブラフィッシュ成魚終脳における意思決定機構の解明**  
**Elucidation of Decision Making Mechanism in the Telencephalon of**  
**Adult Zebrafish using Virtual Reality**

研究者氏名: 鳥越 万紀夫 Makio Torigoe  
受入研究室: 脳神経科学研究センター  
意思決定回路動態研究チーム  
(所属長 岡本 仁)

生物にとってその状況に応じた適切な行動をとる、いわゆる意思決定は生存に不可欠である。本研究ではこの機構を明らかにするためのモデル生物としてゼブラフィッシュ成魚に着目し、仮想空間-2光子カルシウムイメージングシステムを構築することで意思決定過程がどのような神経アンサンブルによって表現され、それぞれのアンサンブルがどのような役割を果たしているのかを明らかにしようと試みた。ゼブラフィッシュ成魚は哺乳類と比べ非常に小さな脳であるため広い脳領域の神経活動のイメージングが容易であり、さらには意思決定に寄与する皮質基底核回路を持っている。

仮想空間-2光子カルシウムイメージングシステムを用い、仮想空間において色を指標にしたGO/NOGO嫌悪学習を行っている魚の終脳の神経活動を観察・解析した。GO課題では手前が青、向こう側に赤が提示され、NOGO課題ではその逆の色パターンが提示される。GO課題では赤に逃げなければならない、NOGO課題では赤に留まらなければならない。この条件を満たさなかった場合は電気ショックを与える。魚がこのルールを学習した後、電気ショックと連合させていた色を青から赤へ変える逆転学習を行った。その結果、原学習では学習後に青を見ると活動していた神経アンサンブルを観察した。面白いことにこのアンサンブルは逆転学習を学習すると青を見ても活動しなかった。一方で逆転学習を学習後に赤を見ると活動する神経アンサンブルを観察した。また同時に安全な色にいるときに活動する神経アンサンブルも観察した。以上のことはこ

れらのアンサンブルは色に付加された負の価値と相対的に正の価値を表現していることを示唆している。また原学習の学習後に魚の行動を仮想空間に反映しないオープンループ条件に変更し、学習した魚が描く予測とは異なる環境を作り出した。その結果、GO課題の青領域において景色が後ろに流れると活動が抑制されるアンサンブルを同定した。このアンサンブルはGO課題を成功するために結果的に抑制されなければならない。よって魚は学習後に色に付加された正負の価値を表現するルールと好ましい状態を予測として脳内において形成し、これらをそれぞれ最大化、最小化するために行動プログラムを作成すると考えられる。以上の結果は比較的単純な脳を持つ魚でも内部モデルを用いた行動選択を行っており、動物一般において備わっている意思決定機構にも迫っていることも示唆している。

●誌上発表 Publication

Makio Torigoe, Tanvir Islam, Hisaya Kakinuma, Chi Chung Alan Fung, Takuya Isomura, Hideaki Shimazaki, Tazu Aoki, Tomoki Fukai and Hitoshi Okamoto. "Future state prediction errors guide active avoidance behavior by adult zebrafish." BioRxiv, DOI: 10.1101/546440,

●口頭発表 Oral Presentations

Makio Torigoe, Tanvir Islam, Hisaya Kakinuma, Chi Chung Alan Fung, Takuya Isomura, Hideaki Shimazaki, Tazu Aoki, Tomoki Fukai and Hitoshi Okamoto.

to. “Future state prediction errors guide active avoidance behavior by adult zebrafish.”, The 42<sup>nd</sup> Annual Meeting of the Japan Neuroscience Society. Niigata, Japan, July, Symposium.

●ポスター発表 Poster Presentations

Makio Torigoe, Tanvir Islam, Hisaya Kakinuma, Chi

Chung Alan Fung, Takuya Isomura, Hideaki Shimazaki, Tazu Aoki, Tomoki Fukai and Hitoshi Okamoto. “Future state prediction errors guide active avoidance behavior by adult zebrafish.”, The 14<sup>th</sup> International Zebrafish Conference (IZFC), Suzhou, China, June

**XVII-031 Reversing the Chromatin Defects in An Adult Circuit to Rescue An Autism Syndrome Model in *Drosophila*.**

Name: Yun Jin PAI

Host Laboratory: Laboratory for Neurodiversity

RIKEN Center for Brain Science

Laboratory Head: Adrian MOORE

Next-generation sequencing studies in patient cohorts of neuropsychiatric and autism spectrum disorders have highlighted the importance of chromatin reorganization during neurodevelopment. In ASD animal models with mutations in chromatin regulators, learning deficits can be rescued at adult stages by reversing the loss of chromatin regulation. In addition, defects in dendritic morphology have been reported in *Drosophila* models of neurological disorders including syndromic autism models such as Fragile X. I intend to understand the mechanisms underlying the cognitive and morphological defects in *Drosophila* ASD models harbouring mutations in chromatin regulator genes at the epigenomic and transcriptomic level.

I established a social space assay to screen for behavioural phenotypes in the fly, and found that adult flies to exhibit abnormal nearest neighbour distance when compared with wild-types. Knocking down *Chro*, *Trl* and *G9a* in dopaminergic neurons produced a nearest neighbour distance phenotype, as did knocking down *Chro*, *Trl* and *ElonginC* in mushroom body gamma (MB  $\gamma$ ) lobe neurons only, suggesting a neuron type-specific role. To further investigate the role of these genes at the transcriptomic and chromatin level and to more easily study their effects on neuronal morphology, I switched to a fly larval sensory neuron model and conducted a morphology screen. I found that, in addition to *Chro*, other related genes that precipitated

morphological defects in class IV dendrite arborisation (c4da) neurons include *Sens2* (a novel transcription factor), *Cct1*, and *Cct5* (cytoskeletal protein folding).

The complex morphology of class IV neurons is known to be regulated by the transcription factor *Knot*. Interestingly, overexpression of *Sens2* resulted in a similar overbranching phenotype as with *Knot*, suggesting a role for *Sens2* akin to *Knot* in c4da development. Antibody staining of these genes in wildtype larvae revealed that levels of *Knot*, *Sens2* and *Chro* decrease over time from 72 to 120hr after egg laying (AEL), while levels of *Pfdn2* (which binds to CCT members) first increase from 72 to 96hr AEL, and then decreases by 120hr. A series of genetic interaction studies utilizing loss-of-function models of *Knot*, *Sens2*, *Cct1*, *Cct5* and *Actin42A* revealed a possible feedback mechanism from cytoskeletal proteins in regulating growth and maturation of c4da neurons, which may be differentially controlled by *Knot* and *Sens2*. Utilizing a CAGE transcriptional profiling dataset in c4 neurons that is available in the Moore lab and carrying out promoter motif analyses on them, I discovered that *ElonginC*, *Cct1*, *Cct5* and *Actin42A* are amongst a group of effector genes which contain motifs bound by *Sens2* and *Chro*-associated proteins and that they collectively play a role during the c4 expansion process. I am currently focusing on elucidating the mechanism of *Chro* and its role in chromatin regulation in c4 neurons.

## ●Publications

Review articles

Yoong L.F., Pai Y.J. and Moore A.W.: Stages and transitions in dendrite arbor differentiation. *Neurosci. Res.* (2018) in print

Pai Y.J. and Moore A.W.: Dendritic actin delivery service. *J Cell Biol.* 217(10):3325-3326. (2018) published

## ●Oral Presentations

Conferences

Pai Y.J., and Moore A.W.: "The control and effector network of neuronal scaling and neuron-level dendritic arbor diversification" Neurobiology of Dro-

sophila Meeting, Cold Spring Harbor, New York USA 2019, October 1-5.

Pai Y.J., and Moore A.W.: "How do neurons undergo massive size expansion from birth until adulthood?" 1st RIKEN CBS Retreat, Chiba, Japan 2019, February 25-26.

## ●Poster Presentations

Conferences

Pai Y.J., and Moore A.W.: "How do neurons undergo massive size expansion from birth in the embryo until adulthood?" RIKEN CBS Retreat, Chiba, Japan 2019, February 25-26.

## XVII-032 Neural basis of odor-taste multisensory integration in *Drosophila*

Name: Hongping WEI

Host Laboratory: Laboratory for Circuit Mechanisms of Sensory Perception

RIKEN Center for Brain Science

Laboratory Head: Hokto KAZAMA

We perceive the world with multiple sensory systems of various modalities. Information obtained through these systems is integrated in our brain for us to form perception and to make action selection. However, because of the complexity of the human brain, how multisensory inputs are integrated in the brain at cellular and circuit levels remains poorly understood. The aim of my study is to investigate how information about taste and odor is integrated in the brain to guide feeding behavior in *Drosophila*. When sucrose solution, a taste stimulus, is presented to the taste neurons on the legs or a mouth, a fly will extend its mouthpart, the proboscis, and try to drink. This behavior is called proboscis extension reflex (PER), which is the initial step of feeding behavior. In my preliminary data, I found that besides tastants, odors alone can also evoke PER, which indicates that PER is a multisensory behavior.

The aim of my study is to investigate how taste and odor are integrated and then guide feeding behavior in *Drosophila*. This year, I have been focusing on the cel-

lular and molecular mechanisms of odor-evoked PER. My progress includes:

- 1) By comparing the level of PER in fed and starved flies, I found that odor-evoked PER is state dependent, starvation enhances PER.
- 2) To test if this odor-evoked PER is mediated by the olfactory system, I silenced olfactory receptor neurons by expressing potassium channel kir2.1 using Orco- Gal4. Expression of kir2.1 reduced, but did not eliminate the responses. It suggests that the gustatory system is sufficient to induce odor-evoked PER.
- 3) To examine the contribution of gustatory system and identify the neurons responsible for odor-evoked PER, I silenced three different subtypes of GRNs respectively by expressing kir2.1 in them.

First, we silenced sweet-sensing Gr5a neurons. Control flies exhibited robust PER to odors, Gr5a-silenced flies only showed weak responses, indicating that these GRNs are necessary for odor-evoked PER.

Second, I used Gr66a to drive the expression of

kir2.1 to silence the bitter sensing neurons. When bitter neurons were silenced, the flies showed an enhancement in PER level compared with control flies. This indicates that in control flies bitter sensing neurons suppresses PER to odors, and this suppression is eliminated when bitter sensing neurons are silenced.

Third, I examined the contribution of water-sensing neurons in odor-evoked PER. There is no difference in PER level between control and silenced flies. So water sensing neurons are not required for odor-evoked PER.

4) To test the involvement of gustatory receptors, I observed odor-evoked PER in a Gr5a receptor mutant and found that PER is nearly undetectable in the mutant.

Therefore, Gr5a gustatory receptor is necessary for odor-evoked PER.

The role of Gr5a receptor in odor-evoked PER was also verified by other two evidences,

- Down regulation of Gr5a using RNAi reduces odor-evoked PER.
- Gr5a GRNs in Gr5a mutant flies do not respond to odors.

5) With the help of Ka Chung Lam, I tracked proboscis movement over time with deeplabcut, which is a method for markerless pose estimation based on ma-

chine learning. Proboscis movement can be traced automatically, that makes data analysis faster and more efficient.

6) I examined if GRNs can integrate odor and taste stimuli. I presented sucrose solution with or without banana odor on the tip of the proboscis. Presentation of 0.25% sucrose alone induced PER at 20 % probability, and this percentage increased to 60% when banana odor was co-applied. Importantly, this enhancement was observed even in flies where olfactory organs are removed. These results suggest that GRNs function as an odor-taste multisensory integrator.

#### ●Oral Presentations

Wei HP, Lam KC, Kazama H. “Gustatory receptor neurons act as an odor-taste multisensory integrator in *Drosophila*” CBS Young Investigators Seminar, Saitama Japan, 2020 Jan 24

#### ●Poster Presentations

Wei HP, Lam KC, Kazama H. “Odor-taste multisensory integration in *Drosophila*” The 10<sup>th</sup> Congress of Neurosciences, Daegu Korea, 2019 Sep 21-25

## XVII-033

### 新規アルツハイマー病関連因子CAPONによる 神経変性分子メカニズムの解明

#### Elucidation of Molecular Mechanism of CAPON Induced Neurodegeneration in Alzheimer’s Disease

研究者氏名: 橋本 翔子 Hashimoto, Shoko  
受入研究室: 脳神経科学研究センター  
神経老化制御研究チーム  
(所属長 西道 隆臣)

アルツハイマー病 (AD) の病理形成機構としては、アミロイドβペプチド (Aβ) の凝集が引き金となって、神経原線維変化 (タウ病理) の形成、神経細胞死に至るというアミロイドカスケード仮説が支持されている。しかし、Aβ沈着からタウ病理、神経細胞死への至るメカニズムは不明である。そこで、タウ病理形成に関わるタンパク質を、タウインターラクトーム解析によって網羅的に探索した結

果、CAPON (C-terminal PDZ ligand of nNOS) というタンパク質をタウ結合タンパク質として同定した。CAPONは、NMDA受容体を介した興奮毒性などに関わることなどが知られていたが、ADにおける機能は不明であった。

まず、*App* KIマウスの脳におけるCAPONの発現を解析したところ、海馬の錐体細胞層にCAPONが蓄積していることを見出した。このことからアミロ

イド病理下におけるCAPONの海馬での蓄積がその後のAD病理に影響を及ぼすと考えられる。次に、CAPONの蓄積が脳の病理にどのような影響を及ぼすのかを調べるため、*App* KIと*MAPT* KIのdKIマウスにおいて、アデノ随伴ウイルスを用いてCAPONを過剰発現させた。その結果、神経細胞死に伴う海馬の萎縮が誘導された。さらにこの細胞死がどのような機構で誘発されるのか調べたところ、アポトーシスマーカーだけではなく、ネクロトーシスや炎症性細胞死のパイロトーシスのマーカーの上昇も認められた。このことから、単一の経路ではなく、複雑なメカニズムを経て神経細胞死が誘発されると考えられる。

さらに、CAPON過剰発現マウスでみられる神経細胞死は、タウ病理依存的に起こるのか否か解析した。まず、CAPON過剰発現マウスにおけるタウ病理を解析したところ、リン酸化タウ及び不溶性タウの上昇がみとめられた。次に、タウノックアウトマウスにおいてもCAPONを過剰発現させた。その結果、予想に反してタウノックアウトにおいても神経細胞死が誘導された。このことから、CAPONはタウ病理依存的だけでなく、非依存的にも神経細胞死を誘導すると考えた。さらに、タウ病理依存的な神経細胞死の存在を確かめるため、タウオパチーモデルであるP301S-タウトランスジェニック (P301S-Tau-Tg) マウスにおいて、*Capon* 遺伝子をノックアウトさせた。その結果、タウ病理と神経細胞死が抑制された。このことから、CAPONはタウ病理形成に関わっており、タウ病理依存的な神経細胞死にも関与することが考えられる。

以上の結果から、CAPONはアミロイド病理下において、タウ病理、神経細胞死を誘導する重要な因子であるといえる。CAPON機能を阻害する方法を開発できればADの新しい治療法となることが期待できる。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Shoko Hashimoto, Yukio Matsuba, Naoko Kamano, Naomi Mihira, Naruhiko Sahara, Jiro Takano, Shin-ichi Muramatsu, Takaomi C Saido, Takashi Saito: “Tau binding protein CAPON induces tau aggregation and neurodegeneration”, *Nature communications* 10 (1), 1-16

Takashi Saito, Naomi Mihira, Yukio Matsuba, Hiroki Sasaguri, Shoko Hashimoto, Sneha Narasimhan, Bin Zhang, Shigeo Murayama, Makoto Higuchi, Virginia MY Lee, John Q Trojanowski, Takaomi C Saido: “Humanization of the entire murine *Mapt* gene provides a murine model of pathological human tau propagation”, *Journal of Biological Chemistry* 294 (34), 12754-12765

Keiro Shirovani, Yuma Hori, Ryohei Yoshizaki, Eri Higuchi, Marco Colonna, Takashi Saito, Shoko Hashimoto, Takaomi C Saido, Nobuhisa Iwata: “Aminophospholipids are signal-transducing TREM2 ligands on apoptotic cells”, *Scientific reports* 9 (1), 1-9

(総説)

橋本翔子, 城野博史: “アルツハイマー病の進行に関わる新規タンパク質CAPONの発見”, *臨床化学* 49巻1号

#### ●口頭発表 Oral Presentations

Shoko Hashimoto: “Mechanisms of redox perturbation in the *App*-knockin mouse model of Alzheimer’s disease”, 第42回日本神経科学会 (Neuro2019), 新潟, 2019年7月25日

橋本翔子, 松葉由紀夫, 釜野直子, 三平尚美, 高野二郎, 佐原成彦, 村松慎一, 斉藤貴志, 西道隆臣: “アルツハイマー病を促進させる新規タンパク質CAPONの機能解析”, 第92回日本生化学会大会, 横浜, 2019年9月19日

橋本翔子, 西道隆臣: “タウタンパク質の凝集と脳の萎縮を加速する因子CAPONの同定”, 東京, 2019年11月8日

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

橋本翔子, 松葉由紀夫, 釜野直子, 三平尚美, 高野二郎, 佐原成彦, 村松慎一, 斉藤貴志, 西道隆臣: “アルツハイマー病を促進させる新規タンパク質CAPONの機能解析”, 第92回日本生化学会大会, 横浜, 2019年9月19日

橋本翔子, 松葉由紀夫, 釜野直子, 三平尚美, 高野二郎, 佐原成彦, 村松慎一, 斉藤貴志, 西道隆臣: “アルツハイマー病の進行に関わる新規タンパク質CAPONの機能解析”, 東京, 2019年11月8日



## XVII-034 Proteinaceous Nanostructures for Intracellular Sensing Fabricated By Direct Laser Writing in a Temperature-Controlled Microfluidic Device

Name: Daniela SERIEN

Host Laboratory: Advanced Laser Processing Research Team

RIKEN Center for Advanced Photonics

Laboratory Head: Koji SUGIOKA

In the present study, direct femtosecond laser exposure induces multi-photon cross-linking to fabricate proteinaceous microstructures. We discovered that fabrication from pure protein precursor can be achieved. This finding is beneficial for the application of intracellular sensing because there will be only exposure to the protein(s) of choice. We study pure proteinaceous microstructures made from two biologically relevant families, serum albumin proteins and fluorescent proteins. Serum albumins and fluorescent proteins are applied in biomedical studies to influence binding properties and to label by fluorescence, respectively. All of our research effort now considers microstructures made from pure protein precursor. By removing the risk from entrapped remaining photoinitiator causing unwanted influence to the experiment or analysis, our finding carries important impact for any medical application of this technology.

Using methods such as Raman spectroscopy and scanning electron microscopy, we provide evidence that chemical cross-linking in the pure protein precursor is induced by laser exposure. We show the chemical cross-linking by acid-catalyzed hydrolysis. These observations are further supported by FTIR spectroscopy, documenting the disappearance of protein bands during the hydrolysis process. Understanding the cross-linking mechanism is important to predict necessary protein precursor conditions and to predict fabrication results for improved device fabrication. We continue to revise our detailed understanding regarding the relationship of fabrication conditions and fabricated feature sizes.

We successfully fabricated fluorescent microstructures from pure precursor of recombinant blue, green and red fluorescent protein. The comparison for fluorescent proteins is complicated by the different absorption and emission spectra of each variant. We continue

to investigate the retention of fluorescence and also the shift in the respective fluorescence emission of the microstructures made from fluorescent protein. Most noticeably, we find a dependence of the fabrication conditions such as total accumulated fluence. By repeated investigation of aged samples, we discovered that their fluorescence after fabrication has a promising shelf life. This finding provides a promising outlook for the application of fluorescent protein microstructures in biomedical devices.

### ●Publications

Review articles

Serien D., and Sugioka K.: Three-dimensional printing of pure proteinaceous microstructures by femtosecond laser multiphoton cross-linking, *ACS Biomaterials Science & Engineering* 2020, 6, 2, 1279–1287, DOI: 10.1021/acsbiomaterials.9b01619

Other

Serien D., and Sugioka K., Best Paper Award for 2018/2019, in recognition of the high impact of the excellent paper by *Opto-Electronic Advances*, July, 2019

### ●Oral Presentations

Invited talks

Serien D., Kawano H., Miyawaki A., and Sugioka K.: Recent Advances in 3D Printing of Pure Proteinaceous Microstructures by Femtosecond Laser Direct Write, SPIE Photonics West 2020 LASE, San Francisco, USA, Feb. (2020)

Serien D., Kawano H., Miyawaki A., and Sugioka K.: Recent Advancements in femtosecond laser-induced fabrication of pure 3D proteinaceous microstructures, 38th International congress on applications of lasers & electro-optics (ICALEO 2019), Orlando, USA, Oct. (2019)

## Conferences

- Serien D., Kawano H., Miyawaki A., and Sugioka K.: Alteration of fluorescence in different pH environments for green fluorescent protein microstructures fabricated by femtosecond laser direct write, SPIE Photonics West 2020 BiOS, San Francisco, USA, Feb. (2020)
- Serien D., Kawano H., Miyawaki A., and Sugioka K.: バイオ応用のためフェムト秒レーザー直接描画によるタンパク質微細構造の3Dプリンティング, 多次元細胞計測ワークショップ, Wako, Japan, Nov. (2018)
- Serien D., Kawano H., Miyawaki A., and Sugioka K.: Fluorescence Retention of Aged Fluorescent Proteinaceous Microstructures, 理第80回応用物理学会秋季講演会, Sapporo, Japan, Sept. (2019)
- Serien D., and Sugioka K.: Exploring the Quenching of Protein Cross-Linking during Femtosecond Laser Direct Write, 理第80回応用物理学会秋季講演会, Sapporo, Japan, Sept. (2019)
- Serien D., and Sugioka K.: 3D Printing of Pure Proteinaceous Microstructures by Femtosecond Laser Direct Write, COLA 2019 -15th International Confer-

ence on Laser Ablation, Maui-Hawaii, USA, Sept. (2019)

Serien D., Abe M., Terakawa M., Kawano H., Miyawaki A., Midorikawa K., and Sugioka K.: Femtosecond Laser Direct Write of Pure Fluorescent Proteins, 20th Int. Sym. on Laser Precision Microfabrication (LPM 2018), Hiroshima, Japan, May (2019)

Serien D., and Sugioka K.: F Model-Based Feature Size Analysis of Pure Proteinaceous Microstructures Fabricated by Femtosecond Laser, 20th Int. Sym. on Laser Precision Microfabrication (LPM 2018), Hiroshima, Japan, May (2019)

## ●Poster Presentations

### Conferences

Serien D., Kawano H., Miyawaki A., and Sugioka K.: 3D printing of proteinaceous microstructures, 理研シンポジウム 第7回「光量子工学研究」, Wako, Japan, Dec. (2019)

Serien D. and Sugioka K.: フェムト秒レーザー直接描画によるタンパク質の微細構造の3Dプリンティング, 理研東北大学連携ワークショップ, Sendai, Japan, Oct. (2019)

## XVII-035

### 無意識的推論の数理モデルの拡張と精神障害モデルへの応用

#### Enhancement of mathematical model of unconscious inference and application to computational psychiatry

研究者氏名: 磯村 拓哉 Takuya Isomura

受入研究室: 脳神経科学研究センター

数理脳科学研究チーム

(所属長 豊泉 太郎)

本研究課題では、脳の神経回路がどのように内部生成モデルを表現し、感覚入力の背後にあるダイナミクスや原因を無意識的に推論しているかについて、数理手法を用いて研究を行なった。本年度の達成状況としては、脳の数理理論構築につながると期待される理論を複数提案した。まず、標準的な神経ネットワークモデルにおいて、発火活動と可塑性が同一のコスト関数から導出されるとき、そのコスト関数はバイズ推定におけるコスト関数である変分自由エネルギーと漸近的に等価であることを数理的に示した。これは自由エネルギー原理が神経回路の従

う基本原理として妥当であることを数理的に示した重要な成果だと思われる。また昨年度から継続して行った最適予測手法の開発においては、提案手法が汎化予測誤差の最小解および真のシステムの隠れ状態・パラメータ・次元数を大域収束保証付きで求められることを数理的に示した。これは生物が限られた観測をもとに柔軟かつ頑健に外界を推論・予測できる能力を理解する上で重要な成果だと思われる。さらに、ベイジアンフィルターの混合モデルに基づく脳のモデルの開発に着手した。これらを統合した理論的枠組みは動的に変化する環境に柔軟に適応で

きる脳の機能を理解する上で重要であり、新たな学習スキームの構築につながると期待される。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Isomura, T., Parr, T. & Friston, K.: “Bayesian filtering with multiple internal models - towards a theory of social intelligence”, *Neural Computation*, 31:2390-2431 (2019)\*

Isomura, T. & Toyozumi, T.: “Multi-context blind source separation by error-gated Hebbian rule”, *Scientific Reports*, 9:7127 (2019)\*

Palacios, E.R., Isomura, T., Parr, T. & Friston, K.: “The emergence of synchrony in networks of mutually inferring neurons”, *Scientific Reports*, 9:6412 (2019)\*

Yamaguchi, I., Isomura, T., Nakao, H., Ogawa, Y., Jimbo, Y. & Kotani, K.: “Suppression of macroscopic oscillations in mixed populations of active and inactive oscillators coupled through lattice Laplacian”, *Journal of the Physical Society of Japan*, 88(5):054004 (2019)\*

#### ●口頭発表 Oral Presentations

Isomura, T.: “Reverse engineering neural networks to characterize their cost functions”, *MACS International Symposium: Computational Principles in Active Perception and Reinforcement Learning in the Brain*, Kyoto University, Kyoto, February (2020).

Isomura, T.: “Reverse engineering approach to characterize cost functions and generative models for neural networks”, *Combining Information theoretic Perspectives on Agency (CIPA) Workshop*, The University of Tokyo, Komaba, January (2020).

Isomura, T.: “Reverse engineering neural networks reveals a formal correspondence between the adaptation of neural networks and variational Bayesian inference”, *19th China-Japan-Korea Joint Workshop on Neurobiology and Neuroinformatics (NBNI2019)*, Chongqing, November (2019).

Isomura, T.: “Biological plausibility of variational free energy as a cost function for neural networks”, *生理研研究会2019 認知神経科学の先端「脳の理論から身体・世界へ」*, 岡崎, 9月 (2019).

磯村拓哉.: “わかりやすい自由エネルギー原理”, 第42回日本神経科学大会 教育講演, 新潟, 7月 (2019).

Isomura, T.: “Predicting concise hidden-state dynamics with an accuracy guarantee”, *Computational Neuroscience Conference Workshop*, Barcelona, July (2019).

Isomura, T.: “Possible implementations of the free-energy principle in biological neural networks to optimize inference and prediction”, *Society for the Neural Control of Motion, Workshop*, Toyama, April (2019).

### XVII-036 Growth and Characterization of AlGaN based UVA and UVB LEDs/LDs on AlN template on sapphire substrate or on AlN substrate or on nano-PSS

Name: Muhammad Ajmal KHAN

Host Laboratory: Terahertz Quantum Device Research Team

RIKEN Center for Advanced Photonics

Laboratory Head: Hideki HIRAYAMA

By the Minamata Convention on Mercury, regulation on Mercury use will be stricter from this year of 2020. More explicitly, ultraviolet - B (UVB LEDs) devices are strongly needed for both medical and agricultural applications such as those in immunotherapy (psoriasis, vitiligo), vulgaris treatment (310nm), plant

growth under UVB lightning (310nm), prevention of plant diseases (294nm), the production of vitamin D<sub>3</sub> in the human body (294nm) and production of phytochemicals in the green leaves of vegetable (310nm). Currently most of the UV-light sources are based on mercury UV-Lamps, which are severely toxic and haz-

ardous. Therefore, environmentally safe and clean materials are needed for the crystal growth and fabrication of ultraviolet - B (UVB) and -A (UVA) light - emitting diodes (LEDs) and UV laser diodes (UV LDs). Among such materials, semiconducting aluminium gallium nitride (AlGaN) - based UVB LEDs and LDs grown on AlN template is one of the best options. Because, variation of the aluminum composition ( $x$ ) in  $Al_{1-x}Ga_xN$  makes it possible to control the bandgap between 6.2 eV (AlN) and 3.4 eV (GaN) for application in the NB-emission of UVA, UVB and UVC LEDs as well as UV LDs. Some other advantages of using AlGaN materials for UVB LED light sources are: (1) the possibility of high internal-quantum-efficiency ( $\eta_{int}$ ) from the multi-quantum-wells (MQWs) at NB-UVB emission, (2) the possibility of growing both p- and n-type semiconductors in the wide-bandgap spectral region, (3) AlGaN is mechanically hard, UV-transparent and the devices may have long life-times, and (4) it is free from harmful (toxic) Arsenic, Mercury and Lead. AlGaN-based ultraviolet - B (UVB) light - emitting diodes (LEDs) and UVB laser diodes (LDs) have the potential to replace toxic mercury UV-Lamps. Therefore, we are struggling for both AlGaN-based UVA and UVB LEDs (325-340nm) and UVB laser diodes (294nm) respectively using low-pressure metalorganic vapor-phase epitaxy (LP-MOVPE) reactor. However, growth of AlGaN materials on AlN template has many challenges. However, two big challenge of high threading dislocation densities (TDDs) in the AlGaN crystal and low hole density in the Mg-doped p-AlGaN layer grown on AlN template are still remaining and under hot debate among the nitride communities. The most severe challenge is the existence of high dislocation densities (TDDs) in the low cost AlGaN materials grown on C-sapphire substrate. Some groups and companies are growing the AlGaN epilayer directly on the single crystal bulk AlN substrate, which is quite expensive as well as having issue with optical transmission of UV lights. For opting to the low-cost growth option of AlGaN crystal on AlN template, we have the challenging issue of large lattice mismatch (LM) at the interface of AlN and C-sapphire substrate. For instance, AlGaN-based crystal growth of UVA LEDs on C-Sapphire with

emission wavelength between 320 nm - 350 nm can be confronted with high level of vertically propagating TDDs (total-TDDs  $\sim 10^{10}$  -  $10^{11}$   $cm^{-2}$ ) in both n-AlGaN buffer layer (BL) as well as in the n-AlGaN electron injection layer (EIL). Such high TDDs were caused by the large LM of  $\simeq 16$  % between AlGaN crystal and sapphire substrate. To reduce these TDDs, an ‘‘ammonia ( $NH_3$ ) pulsed-flow multilayer (ML) growth’’ technique was introduced and good quality of AlN template layers were successfully grown on c-plane (0001)-sapphire substrates in the SR-4000 reactor at Riken. The full width at half maximum (FWHM) values of the X-ray rocking curves (XRCs) of AlN template for the (0002) and (10-12) planes of approximately 200 arcsec and 350 arcsec, respectively (total-TDDs  $\sim 5 \times 10^8$   $cm^{-2}$ ) were achieved. But still the epitaxial growth of AlGaN on an AlN template can have a LM as large as  $\sim 3\%$  for UVA as well as  $\sim 2\%$  for UVB AlGaN, depending on the molar ratio of the Al-contents in the grown layers. These LM at the interface of AlN template and AlGaN layers generates high TDDs in the n-AlGaN EIL underneath the MQWs. It is well known fact that the internal-quantum-efficiency ( $\eta_{int}$ ) is strongly dependent on the crystalline quality including point defects in the MQWs, whereas the crystalline quality of MQWs is further dependent on the vertically propagating TDDs in the n-AlGaN EIL. In this report, the reduction of these TDDs in the n-AlGaN EIL and fabrication of relatively high efficiency UVA and UVB LEDs are briefly discussed. First the AlGaN-based UVA LEDs are discussed in the next section.

(I)- UVA LEDs with wavelength 320 - 350nm: UVA LED, light sources are strongly demanded for both medical and photochemical applications. The most challenging issue is the existence of a high level of TDDs in the  $Al_xGa_{1-x}N$  EIL underneath MQWs, which are caused by the LM of 2.8% between AlN template and AlGaN BL. A second challenge is the existence of strong spontaneous and piezoelectric polarization charges induced at the interfaces of the active layers when III-nitride materials are grown on c-sapphire.

On these two issues, very little work has been done so far to improve the performances of (326-342nm)-band AlGaN UVA LEDs grown on AlN templates on

sapphire substrate. In our previous work on AlGaIn-based UVA LED, the FWHM value of the XRCs along (10-12) plane were found to be as high as 793 arcsec (high level of edge-type TDDs) in the slightly relaxed n-AlGaIn EIL (70% strained). To reduce these TDDs in the UVA AlGaIn materials, we choose two strategies to address these issues, either by introducing a reasonable number of AlGaIn-based superlattices (SLs) as a buffer layer between the AlN template and n-AlGaIn EIL or to grow a thick and highly relaxed n-AlGaIn EIL (Ga-rich condition) on the over layer of n-AlGaIn BL with respect to the fully relaxed AlN template at relatively high growth temperature (without SLs).

In the first strategy, we aim for the suppression of vertically propagating TDDs in the n-AlGaIn BL including highly relaxed (relaxation ratio  $\sim 80\%$ ) n-AlGaIn EIL by introducing the idea of Si-doped n-Al<sub>0.37</sub>Ga<sub>0.63</sub>N/n-Al<sub>0.27</sub>Ga<sub>0.73</sub>N superlattices (SLs) between AlN template and n-AlGaIn BL for the demonstration of 341 nm UVA LEDs. When the conventional n-AlGaIn BLs were replaced with n-AlGaIn SLs-based BLs (with suitable number of periods upto  $\sim 70$ ) in the UVA MQWs, then the FWHM XRCs in the n-AlGaIn EIL for (0002) and (10-12) planes respectively, were reduced to 346 arcsec and 431 arcsec and the total threading dislocation densities (TDDs) were suppressed to approximately  $\sim 1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ . Finally, when the conventional Ni (20 nm)/Au (150 nm) p-electrodes were replaced with highly reflective (reflectivity  $\sim 84\%$ ) Ni (1 nm)/Mg (200 nm) p-electrodes in the n-AlGaIn SLs-based UVA LEDs, the EQE was enhanced from 0.7 % to 1 % at 45 mA under the CW-operation at RT. Consequently, the maximum light output power ( $L$ ) was also improved from 2.1 mW to 2.5 mW at 341 nm. The LEE was improved by introducing a highly reflective Ni/Mg p-type electrode as well as using highly transparent Mg-doped p-AlGaIn contact layer. The demonstration of UVA LED is promising for the realization and reinforcement of UVA LD structure grown on AlN template and it can be a potent device for opening a path to new applications.

As a second strategy, an idea of highly relaxed n-AlGaIn EIL underneath the MQWs for the suppression of both TDDs and piezoelectric effect was introduced

(without SLs BLs). When the Ga-rich n-AlGaIn EIL in the UVA LED was relaxed up to 75%, the FWHM values of the XRCs for the (10-12) planes were reduced from our previous value of approximately 793 arcsec to 564 arcsec. However, carrier confinement and transport issues in the MQWs were observed. To resolve these issues of carrier confinement and transport, we provide a short roadmap for experimental efforts to realize an  $\eta_{int}$  beyond 53% in an AlGaIn UVA-MQWs. Briefly speaking, a Ga-rich, highly relaxed (relaxation ratio  $\sim 75\%$ ) and 2 $\mu\text{m}$ -thick AlGaIn BL based UVA LED structure (c-sapphire/AlN template/Si-doped n-AlGaIn BL/ Si-doped n-AlGaIn EIL/MQWs (active region)/MQB-EBL/p-AlGaIn Hole Injection Layer (HIL)/p-AlGaIn Contact Layer)) with a single peak operation at 326 nm emission was successfully demonstrated. The relative transmittance of UVA light  $\sim 85\%$  through the p-AlGaIn side of the UVA LED was confirmed. When a Ga-rich and highly relaxed  $\sim 75\%$  n-AlGaIn EIL was introduced underneath the MQWs of UVA LED, a maximal  $L$  of 3.1 mW under 127 mA on bare wafer conditions under cw-operation was demonstrated. The issue of carrier's confinement in the UVA-MQWs was suitably suppressed, by increasing the Al-alloy difference between quantum-well-barrier (QWB) and quantum-well (QW) from 6% to 14%. Finally, when the thicknesses of QWB, QW and ud-AlGaIn FB, respectively, were reduced to 12 nm, 3 nm and 10 nm in the 326nm-band UVA-MQWs, a record internal-quantum-efficiencies ( $\eta_{int}$ ) of 62% at 200 K and 53% at 300 K were achieved. The improved UVA-MQWs structure with 53%  $\eta_{int}$  is a promising way to enhance the external-quantum-efficiencies ( $\eta_{ext}$ ) of the AlGaIn-based UVA emitters with various option-based heterojunctions. Based on our knowledge, this is the highest value of  $\eta_{int}$  from AlGaIn-based UVA-MQWs grown on AlN template, measured as a function of excitation power density. The remaining challenge was to optimize the potential barrier height of ud-AlGaIn FB as well as the activation of holes in the p-AlGaIn hole injection layer (HIL) for highly efficient AlGaIn-based UVA LED and LD devices in the near future. In the next section the crystal growth and device fabrications of 294-310nm UVB LEDs will be discussed.

(II)-High power UVB LEDs with emission wavelength 294nm-310nm: We began our research and development of AlGa<sub>N</sub> UVB LED devices here at Riken since 2017, with medical science (294-310nm) as well as agricultural applications (310nm) in mind.

First, the crystal growth and device fabrication of 310nm UVB LED will be discussed. Previously, the internal-quantum-efficiencies ( $\eta_{int}$ ) were enhanced from 47% to 54% in AlGa<sub>N</sub> UVB MQWs. However, some non-linear behavior in  $L$  and  $\eta_{ext}$  of 310nm-band UVB LEDs were observed. First, the influence of both the number of n-AlGa<sub>N</sub> BLs and the type of p-electrodes on the recovery of linear behavior in the  $L$  and  $\eta_{ext}$  were investigated. It was found that the nonlinearity in the  $L$  and  $\eta_{ext}$  of UVB LED is independent of the number of BLs as well as type of p-electrodes. Therefore, finally the dependence of nonlinearity in the  $L$  and  $\eta_{ext}$  on the thickness of quantum-well-barrier ( $T_{QWB}$ ) of multi-quantum-wells (MQWs) were also considered. Subsequently, the issue of nonlinear behavior in the  $L$  and  $\eta_{ext}$  was resolved by the thickness reduction of  $T_{QWB}$  from 25 nm to 10 nm in the MQWs. Similarly, a reasonable value of improvement in both the  $L$  and  $\eta_{ext}$ , respectively, up to 12 mW and 2.2% of 310nm-band UVB LED were realized under continuous-wave (cw) at room temperature (RT) were achieved. Such improvement is attributed to the optimal distribution of electron-hole pairs inside the MQWs, which is caused by the reduction of  $T_{QWB}$  for efficient hole transport across the MQWs. Previously, in all devices of 310nm-band UVB LEDs including the best LED, where 32% relaxed n-AlGa<sub>N</sub> EIL underneath the MQWs were used (2018). However, in recent results, a relatively thick 3.4  $\mu$  m n-AlGa<sub>N</sub> BL and highly relaxed (relaxation ratio  $\sim$  50%) n-AlGa<sub>N</sub> EIL underneath the MQWs was introduced (2019). It was found that the 3.4  $\mu$  m-thick n-AlGa<sub>N</sub> BL and 50% relaxed n-AlGa<sub>N</sub> EIL grown on AlN template serves as a pseudo-substrate to release the strain in the quantum-well-barriers (QWBs) and to avoid extended defects or Al-alloy composition fluctuation in the active region (MQWs) of UVB LEDs. The first QWB of MQWs between n-AlGa<sub>N</sub> EIL and MQWs is quite critical for the stress relieving function

to suppress the piezoelectric field. Hence, it was confirmed that the relatively relaxed (50%) n-AlGa<sub>N</sub> EIL underneath the MQWs is key to further suppress the piezoelectric field in the MQWs. In addition to that, the radiative and nonradiative recombination rates of excitons and their effects on  $\eta_{int}$  of AlGa<sub>N</sub>-based UVB MQWs was also investigated.

Briefly speaking, ultimately the issue of nonlinearity in the  $I$ - $L$  and  $I$ - $\eta_{ext}$  were successfully overcome during the operation of 310nm-band UVB LEDs. Subsequently, the  $\eta_{ext}$  up to 4.8% and  $L$  up to 29 mW in the 310nm-band UVB LED under pulse-operation was achieved. Such improvement in the 310nm-band UVB LED is attributed to the optimal distribution of electron-hole inside the MQWs after reduction of  $T_{QWB}$  for efficient hole transport as well as relaxing of n-AlGa<sub>N</sub> EIL underneath the MQWs up to 50%. This result of 310nm-band UVB light emission is expected to be promising for the treatment of immunotherapy, vulgaris treatment, plant lighting for phytochemical enrichment and cancer treatment.

Next, crystal growth and device fabrication of (294-300nm)-band UVB LEDs are discussed. Previously, a reasonably improved crystalline quality of Mg-doped p-AlGa<sub>N</sub> HIL and p-AlGa<sub>N</sub> contact layer were grown for UVB LEDs. In addition to that, high relative UVB-light transmittance  $\geq$  90% through p-AlGa<sub>N</sub> layers for the applications of (290-320nm)-band UVB LEDs were also realized. However, the problem of high TDDs in the n-AlGa<sub>N</sub> EIL (low  $\eta_{int}$ ) and hole injection toward the MQWs still remaining. As we know that the hole-transport from p-AlGa<sub>N</sub> side of UVB LED into the multi-quantum-wells (MQWs) is strongly dependent on the thickness ( $T_{FB}$ ) and Al-contents in the undoped (ud)-AlGa<sub>N</sub> final barrier (FB). Briefly speaking, the influence of  $T_{FB}$  on the performance of AlGa<sub>N</sub>-based UVB LEDs with peak emissions band of 290-300nm were investigated. Especially, the photoluminescence (PL) efficiency from MQWs of the UVB LED devices were investigated and compared to the electroluminescence (EL) spectra as a function of  $T_{FB}$ . Subsequently the dependence of PL efficiency ( $\eta_{int}$ ),  $\eta_{ext}$  and  $L$  on the  $T_{FB}$  of UVB LEDs were attempted, using the same growth condition for all samples

except variation in  $T_{\text{FB}}$ . When,  $T_{\text{FB}}$  was set to 6-7nm, a value of improvement in the  $\eta_{\text{ext}}$  and  $L$ , respectively, at emission band of 295-300nm under cw at RT were achieved. A reasonable improvement in the  $L$  up to 17mW at 80mA of UVB LED, was successfully achieved by using a thin ud-AlGa<sub>N</sub> FB (Al:55%) of approximately 6nm, using highly transparent p-AlGa<sub>N</sub> layers as well as using highly reflective Ni/Al p-electrode. When, the  $T_{\text{FB}}$  was set to approximately 6 nm, and also the band dip at ud-AlGa<sub>N</sub> FB/MQB-EBL interface was minimized in the UVB LED, a value of improvement in the  $\eta_{\text{ext}}$  of 5.6% under 30mA, at 300nm emission was successfully demonstrated on bare-wafer condition, under the cw-operation at RT. This improvement in the device performance, is attributed to the optimally thinner  $T_{\text{FB}}$  as well as having suitable potential barrier height of ud-AlGa<sub>N</sub> FB, which is not only promoting the hole transport toward the MQWs but at the same time also suppressing the Mg-diffusion from the p-AlGa<sub>N</sub> HIL side toward the MQWs of UVB LED.

For 294nm-band UVB LED, the carrier confinement issue in the MQWs was further investigated. Especially the Al-alloy difference between quantum-well-barrier (QWB) and quantum-well (QW) was enhanced in the context of carrier confinement in the MQWs. Furthermore, one new design of moderately Mg-doped p-type multi-quantum-barrier electron-blocking-layer (p-MQB EBL) was introduced into the 294nm-band UVB LED devices for both the electron blocking as well as for promoting to the hole transport. For 294nm-band UVB LED, when the Al-contents were increased from 48% to 55% in the ud-AlGa<sub>N</sub> FB, and the Al-contents difference between QWBs and QWs of MQWs were also increased from 15% to 20%, the maximum  $L$  was greatly enhanced from 17 mW to a record value of 32mW on bare-wafer under pulse-operation at RT. Similarly, the maximum  $\eta_{\text{ext}}$  were also improved from 5.6 % to 6.5 % under pulse-operation at RT, using Ni (1nm) /Al (200 nm) p-electrode and moderately Mg-doped p-MQB EBL.

Very recently, some remarkable improvements in the hole injection efficiency toward the UVB MQWs were realized by using new technique of Al-graded and Mg-doped (p-type) multi-quantum-barrier electron-block-

ing-layer (Grad p-MQB-EBL). When 3.4 $\mu$ m-thick n-AlGa<sub>N</sub> buffer layer (BL) (relaxation ratio  $\sim$  42%) was used and the flat-type multi-quantum-barrier electron-blocking-layer (MQB-EBL) was replaced by Grad p-MQB-EBL,  $L$  as well as  $\eta_{\text{ext}}$ , respectively, were remarkably enhanced from 17 mW and 5.6%, respectively, to a record value of 42 mW and 9.1% on bare wafer condition at RT (2020). Similarly, in the 310nm-band UVB LED the maximum  $L$  was remarkably improved from 7.1mW to a record value of 29 mW with  $\eta_{\text{ext}}$  of 4.9%.

This result of 294nm-band UVB light emission is expected to be promising for production of vitamins D<sub>3</sub> in both human body as well as in animal body too. In the future, some pressing challenges in the AlGa<sub>N</sub>-based UVB LEDs, namely: further reduction of TDDs in the n-AlGa<sub>N</sub> EIL underneath the MQWs (for the enhancement of  $\eta_{\text{int}}$ ), activation of the Mg-atoms in the p-AlGa<sub>N</sub> layers (high hole injections toward the MQWs) and reduction of operating voltages (by Flip-chip technology) are still remaining. Importantly, such controllable multi UVB-wavelength emitters may extend nitride - based LED to previously inaccessible areas, for example, UVB laser and other futuristic devices such as sensors.

(II)-AlGa<sub>N</sub>-based 290nm UVB Laser Diodes (LDs): AlGa<sub>N</sub> deep-ultraviolet (DUV) laser diodes (LDs) have the potential to be used as compact, highly efficient, high-power light sources. The applications for DUV-LDs include sterilization and fine machining of metals or other advanced materials, utilizing the advantage of the very high absorption coefficient of UV light in these materials. Recently, we successfully fabricated AlGa<sub>N</sub> DUV LD structures based on growth techniques used for fabricating highly efficient AlGa<sub>N</sub> LEDs. Laser mirror facets using a laser stealth-dicing (SD) process was fabricated. With current injection of 0.1 kA/cm<sup>2</sup> and under continuous wave (CW) operation, spontaneous emission at a wavelength of 277 nm from the DUV LD structure with a relatively high external quantum efficiency (EQE) of over 4% was observed. We also observed stimulated emission by optical pumping from the AlGa<sub>N</sub> DUV quantum wells with

low threshold exciting power density of 68 kW/cm<sup>2</sup> at room temperature. Very recently using Al-graded polarized cladding layer (GPCL) in the revised UVB LD structure at 290nm emission, where as high as 3 kA/cm<sup>2</sup> injections current density was achieved on bare-wafer condition under pulse operation at RT.

Based on these achievements, we are making great strides to enhance the power of UV devices (emitters) and raise the research levels of III-Nitride community at global scale. We believe that these efforts can contribute to the development of sustainable society in lined with the 17<sup>th</sup> sustainable goals (SDGs) of UN.

## ●Publications

### Review articles

Ajmal Khan M., Maeda N., Itokazu Y., Jo M., Matsuura E., Kashima Y., Yamada Y., and Hirayama H.: 42mW power and 9.1% EQE in AlGaIn-based 304nm-band UVB LEDs using Al-Graded p-type multi-quantum-barrier electron-blocking-layer and 50% Relaxed Electron Injection Layer. In preparation\*

Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Fujikawa S., Ikenoue H., Paolo Bermundo J., Ishikawa Y., and Hirayama H.: Mg-Activation in p-AlGaIn Hole Injection Layer of UV-B LED using Excimer Laser Annealing (ELA) under different Environment. In preparation\*

Ajmal Khan M., Maeda N., Itokazu Y., Jo M., Yamada Y. and Hirayama H.: External-Quantum-Efficiency of 6.5% and 32 mW Operation of 294-310nm AlGaIn UVB LED. Under review\*

Murotani H., Miyoshi H., Takeda R., Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Hirayama H., and Yamada Y.: Radiative and Nonradiative Recombination Rates of Excitons and Their Effects on Internal Quantum Efficiency of AlGaIn-based UVB MQWs. submitted\*

Ajmal Khan M., Takeda R., Miyoshi H., Yamada Y., Fujikawa S., Maeda N., Jo M. and Hirayama H.: Beyond 53% internal quantum efficiency in a AlGaIn quantum well at 326 nm UVA emission and single-peak operation of UVA LED. *Opt. Lett.* 45, 495-498 (2020). DOI: doi.org/10.1364/OL.376894

Ajmal Khan M., Maeda N., Matsuura E., Kashima Y.,

Yamada Y. and Hirayama H.: Influence of Undoped - AlGaIn Final Barrier of MQWs on the Performance of Lateral - Type UVB LEDs.

*Phys. Status Solidi A* 216, 1900185 (2019).

DOI: doi.org/10.1002/pssa.201900185)

Ajmal Khan M., Matsuura E., Kashima Y., and Hirayama H.: Overcoming the current injection issue in the 310 nm band AlGaIn UVB light-emitting diode. *Jpn. J. Appl. Phys.* 59 SAAD01(2020).

DOI: doi.org/10.7567/1347-4065/ab460b

HIRAYAMA H., MAEDA N., JO., Ajmal KHAN M., TADATOMO K., OKADA N., and YAMADA Y.: "Recent Progress toward realizing AlGaIn-based Deep-UV Laser Diodes. *The Review of Laser Engineering* 47(4)196 (2019).

Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Akamatsu Y., Tanabe R., Yamada Y. and Hirayama H.: 13 mW operation of a 295-310 nm AlGaIn UV-B LED with a p-AlGaIn transparent contact layer for real world applications. *J. Mater. Chem. C*, 7, 143-152(2019), DOI: 10.1039/C8TC03825B.

Matsumoto T., Ajmal Khan M., Maeda N., Fujikawa S., Kamata N. and Hirayama H.: Milliwatt Power UV-A LEDs Developed by Using n-AlGaIn Superlattices (SLs) Buffer Layers Grown on AlN Templates. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 52 (2019) 115102,

DOI:10.1088/1361-6463/aaf60a

Ajmal Khan M., Matsumoto T., Maeda N., Kamata N. and Hirayama H.: Improved external quantum efficiency of 293nm-AlGaIn UVB LED grown on AlN template. *Jpn. J. Appl. Phys.* 58, SAAF01 (2019), DOI: 10.7567/1347-4065/aaca6a.

Ajmal Khan M., Sato Y., Sawano Y. and Ishikawa Y.: Enhancing the Short Circuit Current Density Due to the Influence of the Si-buffer Layer at the Hetero Interface of Strained Epi-Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> (x = 0.10) Heterojunction Solar Cell. *J. Phys. D: Appl. Phys.*

51(18):185107.

DOI: doi.org/10.1088/1361-6463/aaf60

### Books

[1] Chapter: Ajmal Khan M. and Ishikawa Y.: In-catalyzed Silicon Nanowires Grown by the VLS Mode for Nanoscale Device Applications. In press\*

[2]. Chapter: Ajmal Khan M. and Hirayama H.: Prog-



ress and Future prospect of AlGa<sub>N</sub> UV-A and UV-B LEDs. submitted\*

#### Other

Japanese Famous Economic Newspaper “NiKKEI” Publish news about our new world record result of 23mW UV-B LED for medical and agricultural applications. (work presented in the IWN 2018 Kanazawa)

<https://tech.nikkeibp.co.jp/atcl/nxt/column/18/00022/00037/>

Cover page of the *physica status solidi (a)*: <https://onlinelibrary.wiley.com/toc/18626319/2019/216/18>

### ●Oral Presentations

#### Conferences

[1] Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Matsuura E., Kashima Y., Yamada Y., and Hirayama H.: AlGa<sub>N</sub> UVB LEDs at 310nm emission with High Efficiency and Light Power Using Partially Relaxed n-AlGa<sub>N</sub> Buffer Layer. (< Oral 1192>)

12th International Symposium on Advanced Plasma Science and its Applications for Nitrides and Nanomaterials (ISPlasma2020), Nagoya University, Nagoya, Japan, 2020, March 8-11.

[2] (Invited Talk ) Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Kashima Y., and Hirayama H.: High performances of AlGa<sub>N</sub>-based UVC and UVB LEDs with relaxed buffer layer as well as using p-type graded multi-quantum-barrier electron-blocking layer. (11280-40) SPIE Photonics West, San Francisco, California, United States, 2020, Feb 1 - 6.

[3] Miyoshi H., Takeda R., Nakao H., Kurai S., Murotani H., Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Hirayama H., and Yamada Y.: AlGa<sub>N</sub>系多重量子井戸構造における励起子の輻射・非輻射再結合レートの励起強度依存性”, 三好博之, 武田椋平, 中生拓希, 倉井聡, 室谷英彰, M. Ajmal Khan, 前田哲利, 定昌史, 平山秀樹, 山田陽一, 第67回応用物理学会春季学術講演会 (上智大学, 2020年3月12 ~ 15日). “Excitation density dependence of radiative and nonradiative recombination rates of excitons in AlGa<sub>N</sub>-based multiple quantum wells” The 67th JSAP Spring Meeting, Sophia Univ., 2020, March 12-15.

[4] Murotani H., Miyoshi H., Takeda R., Nakao H., Kurai S., Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Hirayama H., and Yamada Y.: AlGa<sub>N</sub>系多重量子井戸構造における励起子レート方程式モデルによる効率Droop現象の解析”, 室谷英彰, 三好博之, 武田椋平, 中生拓希, 倉井聡, M. Ajmal Khan, 前田哲利, 定昌史, 平山秀樹, 山田陽一, 第67回応用物理学会春季学術講演会 (於 上智大学 2020年3月12 ~ 15日).

“Analysis of efficiency droop phenomena in AlGa<sub>N</sub>-based multiple quantum wells using rate equations of exciton recombination”,

The 67th JSAP Spring Meeting, Sophia Univ., 2020, March 12-15.

[5] Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Fujikawa S., Yamada Y., and Hirayama H.: 42mW light power from AlGa<sub>N</sub>-based 302nm-band UVB LEDs: a way forward for UVB LEDs. (OD3-3)

The 9th Asia-Pacific Workshop on Widegap Semiconductors (APWS2019)

Okinawa Institute of Science and Technology (OIST), Okinawa, Japan, 2019, Nov 10-15.

[6] Murotani H., Miyoshi H., Takeda R., Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Hirayama H., and Yamada Y.: Radiative and Nonradiative Recombination Rates of Excitons and Their Effects on Internal Quantum Efficiency of AlGa<sub>N</sub>-based UV-B MQWs. (CH3-4)

The 9th Asia-Pacific Workshop on Widegap Semiconductors (APWS2019)

Okinawa Institute of Science and Technology (OIST), Okinawa, Japan, 2019, Nov 10-15.

[7] (Invited Talk) Ajmal Khan M., and Hirayama H.: Past, Present and Future of AlGa<sub>N</sub>-based UVB LEDs and LDs for real world applications.

International Electron Devices and Materials Symposium (2019 IEDMS), New Taipei City, Taiwan, 2019, October 24-25.

[8] Murotani H., Miyoshi H., Takeda R., Nakao H., Kurai S., Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Hirayama H., Yamada Y.: Analysis of efficiency curves in AlGa<sub>N</sub>-based multiple quantum wells using rate equation based on radiative and nonradiative recombination of excitons (2). (19p-E310-10)

The 80th JSAP Autumn Meeting, Sapporo Campus,

- Hokkaido University, Hokkaido, Japan, 2019, Sep 18-21.
- [9] 武田椋平\*, 三好博之\*, 中生拓希\*, 室谷英彰\*\*, 倉井聡\*, M. Ajmal Khan\*\*\*, 前田哲利\*\*\*, 定昌史, 平山秀樹, “UV-B帯AlGa<sub>N</sub>系量子井戸構造,É, ”, “*ト方程式を用いた発光効率曲線解析と発光ダイナミクスの相関*” (*Ia-11*)  
2019年度 応用物理・物理系学会 中国四国支部 合同学術講演会  
日時: 2019年7月21日 (日曜日) 場所: 高知工科大学香美キャンパス  
〒782-8502 高知県香美市土佐山田町宮ノ口185 教育研究棟B・C
- [10] Miyoshi H., Takeda R., Nakao H., Kurai S., Murotani H., Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Hirayama H., Yamada Y.: Analysis of efficiency curves in AlGa<sub>N</sub>-based multiple quantum wells using rate equation based on radiative and nonradiative recombination of excitons. (*19p-E310-9*)  
The 80th JSAP Autumn Meeting, Sapporo Campus, Hokkaido University, Hokkaido, Japan, 2019, Sep 18-21.
- [11] Wang K., Maeda N., Ajmal Khan M., Li Zh., Wu Y., Tao. T, Liu B., Zhang R., Hirayama H.: MBE Grown p-Type AlGa<sub>N</sub> and Deep Ultraviolet Light Emitting Diodes. (Oral: Th50)  
4th International Workshop on Ultraviolet Materials and Devices-4 (IWUMD-4), Saint Petersburg, Russia, 2019, Sep 8-13.
- [12] (Keynotes) Ajmal Khan M., and Hirayama H.: Problems and Latest Achievements in AlGa<sub>N</sub>-Based Deep-UV LEDs.  
4th International Workshop on Ultraviolet Materials and Devices-4 (IWUMD-4), Saint Petersburg, Russia, 2019, Sep 8-13.
- [13] Ajmal Khan M., Takeda R., Miyoshi H., Yamada Y., Fujikawa S., Maeda N., Jo M., and Hirayama H.: Achievement of Internal Quantum Efficiency up to 53% at 326nm-UVA Emission from AlGa<sub>N</sub> QWs with Engineering of Highly Relaxed Buffer Layer. (*Fr-3o*)  
4th International Workshop on Ultraviolet Materials and Devices-4 (IWUMD-4), Saint Petersburg, Russia, 2019, Sep 8-13.
- [14] (Invited Talk) Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Matsuura E., Kashima Y., Yamada Y., and Hirayama H.: Current Status and Future Directions of High Power AlGa<sub>N</sub>-Based UVB LEDs with Emission of 280nm-320nm. (*A07.01*)  
13th International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS-13), hosted in Bellevue, Washington, Seattle’s Eastside, USA, 2019, July 7-12.
- [15] Murotani H., Miyoshi H., Takeda R., Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Hirayama H., and Yamada Y.: Role of exciton recombination processes on internal quantum efficiency in AlGa<sub>N</sub>-based UV-B multiple quantum wells. (*I02.03*)  
13th International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS-13), hosted in Bellevue, Washington, Seattle’s Eastside, USA, 2019, July 7-12.
- [16] Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Matsuura E., Kashima Y., Yamada Y. and Hirayama H.: Realization of High Light Output Power in AlGa<sub>N</sub>-Based UVB LED at 310±2nm Emission Using Highly Relaxed (50%) n-AlGa<sub>N</sub> Electron Injection Layer. (*A10.03*)  
13th International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS-13), hosted in Bellevue, Washington, Seattle’s Eastside, USA, 2019, July 7-12.
- [17] Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Yamada Y., and Hirayama H.: Current Challenges and Future Direction for AlGa<sub>N</sub> Based UV-B LEDs grown by LP-MOVPE. (*Q02OP*)  
The 2019 Spring Meeting of the European Materials Research Society (E-MRS), Nice, France, 2019, May 27-31.
- [18] Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Yamada Y., and Hirayama H.: Effect of 4 μm-thick Buffer as well as 50% relaxed n-AlGa<sub>N</sub> Electron Injection Layer on the Performance of 308nm UV-B LED. (*10p-W541-12*)  
The 66th JSAP Spring Meeting Tokyo Institute of Technology Ookayama Campus, Tokyo, Japan, March 9-12, 2019.
- [19] Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Yamada Y. and Hirayama H.: Improved Current Injection in AlGa<sub>N</sub>-Based 310 nm-UVB LED for Real World Applications. Accepted for oral: (*<18aF100>*)

- 12<sup>th</sup> International Conference on Plasma-Nano Technology & Science (ISPlasma2019), , Nagoya Technology of Institute, Nagoya, Japan, 2019, March 17-21.
- [20] Ajmal Khan M., Maeda N., Yamada Y. and Hirayama H.: Improvement in EQE of 294 -303 nm AlGa<sub>N</sub> UVB LED by increasing the Emission Efficiency from Multiple Quantum Well (MQW). (*OD14-3*)  
The International Workshop on Nitride Semiconductors 2018 (IWN 2018), Kanazawa, Japan 2018, Nov 11-16.
- [21] Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Yamada Y. and Hirayama H.: Over 20 mW operation of 303 nm AlGa<sub>N</sub> UVB LED with p-AlGa<sub>N</sub> transparent contact layer. (*21a-146-9*)  
79th JSAP Autumn Meeting, Nagoya Congress Center, Nagoya, Japan 2018, Sep 18-21.
- [22] Ajmal Khan M., Matsumoto T., Maeda N., Jo M., Kamata N. and Hirayama H.: Investigation of crystallinity and current injection issue in 310nm-AlGa<sub>N</sub> UVB LED grown on AlN template in LP-MOVPE. (*Mo4.4*)  
International Symposium on Growth of III-Nitrides ISGN-7, Warsaw, Poland 2018, August 05-10.
- [23] Ajmal Khan M., Matsumoto T., Itokazu Y., Maeda N., Jo M., Kamata N. and Hirayama H.: 325nm Emission From Highly Transparent AlGa<sub>N</sub> UVA LEDs grown on AlN Template in the LP-MOCVD. (*6A-1.2*)  
The 19th International Conference on Metalorganic Vapor Phase Epitaxy (ICMOVPE-XIX), Nara, Japan 2018, June 03-08.
- [24] Ajmal Khan M., Matsumoto T., Maeda N., Jo M., Kamata N., and Hirayama H.: Narrow Band Milliwatts power operation of AlGa<sub>N</sub> based UVB LED for Medical Applications. Mo-A4.4  
International Conference on UV LED Technologies & Applications (ICULTA-2018), Berlin, Germany 2018, April 22-25.
- [25] Ajmal Khan M., Matsumoto T., Maeda N., Jo M., Kamata N., Hirayama H.: EQE enhancement of AlGa<sub>N</sub> Based Lower Bound (295±2 nm) UVB-LED by using high reflective Ni/Mg electrode for medical applications. (*19a-E202-6*)  
The 65<sup>th</sup> JSAP Spring Meeting, WASEDA University, Tokyo, Japan, March 17 - 20, 2018.
- [26] Ajmal Khan M., Itokazu Y., Matsumoto Y., Minami S., Maeda N., Jo M., Kamata N., and Hirayama H.: Characterization of AlGa<sub>N</sub> based Lower Bound (280-300nm) UVB LED device grown by MOCVD. (*<06pE07O>*)  
11<sup>th</sup> International Conference on Plasma-Nano Technology & Science (ISPlasma2018), Meijo University, Nagoya, Japan, 2018, March 04-08.

### ●Poster Presentations

- [1] Maria Cecilia da Silva Figueira, Trellakis A., Birner S., Ajmal Khan M., Hirayama H.: Optimizing AlGa<sub>N</sub>-Based UVB LEDs Using Experimental Device Data in the Nextnano Software. (*AP02.05*)  
13th International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS-13), hosted in Bellevue, Washington, Seattle's Eastside, USA, 2019, July 7-12.
- [2] Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Yamada Y., Hirayama H.: Progress in 303-310 nm-Band AlGa<sub>N</sub> Based UVB-LED for medical applications.  
jsps162.jpn.org  
日本学術振興会 ワイドギャップ半導体光・電子デバイス第162委員会
- [3] Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Yamada Y., Hirayama H.: Progress in High-Efficiency AlGa<sub>N</sub>-based UVB-LEDs for both Medical and Agricultural Applications.  
The 7th RAP Symposium, Suzuki Umetaro Hall, Wako Campus, RIKEN, Japan, 2019, Dec. 9 - 10.
- [4] Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Yamada Y. and Hirayama H.: Development of 304-310nm-Band UVB LEDs for Both Medical and Agricultural Applications. (*P-83*)  
The 6th RAP Symposium, Wako, Saitama, Japan, 2018, Nov.19-20.
- [5] Ajmal Khan M., Maeda N., Jo M., Yamada Y. and Hirayama H.: Progress in 303-310 nm-Band AlGa<sub>N</sub> Based UV-B LED for medical applications.  
学振<sub>162</sub>特別公開シンポジウム, 東京大学 生産技術研究所 2018, Sep 27-28.
- [6] Matsumoto T., Ajmal Khan M., Itokazu Y., Maeda

N., Jo M., Kamata N., and Hirayama H.: Milliwatt power UVA LEDs developed by using AlGaIn superlattice (SL) buffer layers fabricated on AlN/sapphire templates. (P1-22)

The 19th International Conference on Metalorganic Vapor Phase Epitaxy (ICMOVPE-XIX), Nara, Japan 2018, June 03-08.

## XVII-037      **Generation of single-cycle short-wave infrared pulses via BBO-based optical parametric amplifier**

Name: Yu-Chieh LIN

Host Laboratory: Attosecond Science Research Team

RIKEN Center for Advanced Photonics

Laboratory Head: Katsumi MIDORIKAWA

We demonstrate the amplification of sub-cycle pulses in the short-wave infrared (SWIR) region by using a cascaded BBO-based optical parametric amplifier (OPA) chain, for the first time to the best of our knowledge. By virtue of the tailored wavelength of the pump pulse of 708 nm, we successfully obtained a gain bandwidth of more than one octave for a BBO crystal. The division and synthesis of the spectral components of the pulse in a Mach-Zehnder-type interferometer set in front of the final amplifier enabled us to control the dispersion of each spectral component using an acousto-optic programmable dispersive filter inserted in each arm of the interferometer. As a result, we successfully generated 0.73-optical-cycle pulses at 1.8  $\mu\text{m}$  with a pulse energy of 32  $\mu\text{J}$ . This result will ensure the generation of 1-mJ-class sub-cycle pulses by simply adding an OPA stage with a 10-mJ-class pumping source in the future.

### ●Publications

Papers

Y. C. Lin, Y. Nabekawa, K. Midorikawa, "Optical parametric amplification of sub-cycle shortwave infrared pulses," *Nature Communications*, 11, 3413, (2020).

### ●Oral Presentations

Conferences

Y. C. Lin, "Optical parametric amplifier of a sub-cycle shortwave infrared pulses," the RIKEN-KPSI Symposium, Feb. 13th-14th, Ise-shi, Japan (2020).

Y. C. Lin, Y. Nabekawa, K. Midorikawa, "Sub-optical-

cycle shortwave infrared pulses generation in a cascaded degenerate optical parametric amplifier", Ultrafast Optics XII from Oct. 6th-11th in Brač, Croatia (2019).

Y. C. Lin, Y. Nabekawa, K. Midorikawa, "Dispersion control of an over-octave spanning shortwave infrared spectrum for the amplification of single-cycle pulses" CLEO/Europe-EQEC Conference from June 23th- June 27th in Munich, Germany (2019).

Y. C. Lin, Y. Nabekawa, and K. Midorikawa, "Optical parametric amplification of short-wave infrared monocycle pulses in BBO crystals pumped by red femtosecond pulses" Conference on Lasers and Electro-Optics from May 5th- May 10th in San Jose, California, USA (2019).

Y. C. Lin, Y. Nabekawa, K. Midorikawa, "Generation of single-cycle infrared pulse via BBO-based optical parametric amplifier," The 39th Annual Meeting of Laser Society of Japan, from Jan. 12th to Jan. 14th in Tokyo, Japan (2019).

### ●Poster Presentations

Conferences

Y. C. Lin, Y. Nabekawa, K. Midorikawa, "Stabilization of a Mach-Zehnder interferometer in the sub-cycle OPA system," The 7th RAP Symposium from Dec. 9th to Dec. 10th in Wako-shi, Saitama-ken, Japan (2019).

Y. C. Lin, Y. Nabekawa, and K. Midorikawa, "Generation of single-cycle shortwave infrared pulses in BBO-based cascaded optical parametric amplifier"

## XVII-038 癌幹細胞と胎児期上皮幹細胞に共通する分子コンセプト提唱への挑戦

### The Identification of Common Molecular Mechanism between Cancer Stem Cells and Fetal Epithelial Stem Cells

研究者氏名: 清川 寛文 Kiyokawa Hirofumi

受入研究室: 生命機能科学研究センター

呼吸器形成研究チーム

(所属長 森本 充)

がん細胞は、一度分化し成熟した細胞が喫煙などの外部刺激にさらされ出現する。これは本来細胞が持つ恒常性制御機構の破綻と捉えられるが、また一方でこの恒常性制御機構は胎児期の細胞分化と増殖により確立すると考えられている。そのため胎児期の恒常性の確立を解明することは、恒常性の破綻により生じるがん細胞の理解にもつながる重要な知見となりうる。これまで悪性度の高い癌細胞が示す未分化な性質と、胎児期の未分化細胞の性質は頻繁に比較されてきたが、その実態としての分子挙動の共通性はほとんど分かっていない。そのため本研究では、胎児期末分化細胞とがん細胞間での相違性・相同性を分子レベルでの解明することを目的とした。昨年度は研究の第一歩として胎児期末分化細胞の分化・増殖過程の制御メカニズムの解明を目的に、発生中のマウス気管上皮細胞を用いた single cell RNA-seq (scRNA-seq) を施行した。本年度はまず得られた scRNA-seq のデータ解析から着手し、E14.5 周辺で細胞増殖が急激に停止し、細胞分化が始まることを単一細胞レベルで見出すことに成功した。次にこの増殖から分化への切り替えに重要な因子を転写因子に着目し探索を行った。結果、ID2 遺伝子が気管上皮細胞の増殖から分化の切り替えに同調し、その発現パターンを急激に変化させることを発見し、重要な因子と考えられた。次に胎児期における ID2 の役割を解明するため、ID2 欠損マウスの購入を行い phenotype の解析を行うとともに、ID2

過剰発現マウスの作成を行った。ID2 欠損マウスでは野生型マウスに比べ、増殖が約 1 日早く停止し分化が早期に始まることを見出した。そのため ID2 遺伝子は気管上皮細胞の増殖・分化に対する重要な制御因子であることがわかった。来年度は ID2 過剰発現マウスの解析を通じて ID2 の発生期における役割を確立するとともに、気管培養系を用いた遺伝子操作によりその上流因子・メカニズムに着手する予定である。またガンにおける ID 遺伝子の役割を解明するため、ガン細胞株を用いた検討も行う予定である。

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

清川寛文, 森本充: “The dynamic epithelial transition of developing trachea unveiled by single cell RNA-seq”, Keystone Symposia - Poster Abstracts Endoderm Development and Disease: Cross-Organ Comparison and Interplay, アメリカ, 2月 (2018年)

清川寛文, 森本充: “気管発生時における気道上皮細胞の同調的増殖・分化機構の解明～ single cell RNA-seq を用いて”, 第58回 日本呼吸器学会学術講演会, 大阪, 4月 (2018年)

清川寛文, 森本充: “The dynamic epithelial transition of developing trachea unveiled by single cell RNA-seq”, 第51回 発生物学会, 東京, 6月 (2018年)



基礎科学特別研究員  
2018年度採用者





## Categorical and Dynamical Study of Algebraic varieties

研究者氏名: 大内 元気 Genki Ouchi

受入研究室: 数理創造プログラム

(所属長 初田 哲男)

本研究では、圏論的視点や力学系的視点に基づいて、代数多様体の幾何学を調べる。ホモロジー的ミラー対称性予想や双有理幾何学と導来圏の関係に基づくと、導来圏はある意味で空間概念の一種であると考えられる。次元は幾何学的対象の特徴を測る量として最も基本的なものの一つである。導来圏が空間概念の一種であるならば良い次元論があるべきだが、整備された良い理論は存在しないのが現状である。本年度は、導来圏の次元や代数多様体の対称性について研究を行った。

1. 大阪大学の菊田康平氏と高橋篤史氏と共同で導来圏のSerre関手の力学系により定義されるSerre次元と安定性条件の大域次元について研究した。Serre次元と安定性条件の大域次元の間の不等式を示し、さらに大域次元が1未満の安定性条件を持つ導来圏は、ADE籠の表現の導来圏と同値になることを示した。代数曲線上の接続層の導来圏上の安定性条件の大域次元の下限が1になることを示した。

2. 有限群は、有限単純群とよばれる基本的な有限群にある意味で分解することが知られている。その中でも26個の散在型有限単純群は、それぞれ強烈な個性を持っている。4次元3次超曲面やK3曲面は、その対称性がマシュー群やコンウェイ群と関係していることで知られている。4次元3次超曲面とK3曲面上の接続層の導来圏の関係に注目することで、4次元3次超曲面とK3曲面の自己同型群の関係を記述した。異なる2つの代数多様体の対称性に共通の有限群が現れることを、それぞれ別々に群を求め

ことをせずに説明した。

3. 既約シンプレクティック多様体は、K3曲面を忠実に高次元化した概念である。有限群作用によるK3曲面とアーベル曲面上の接続層の導来圏の関係に注目することで、4次元の一般化クンマー多様体やO'Gradyの6次元多様体をK3曲面上の安定対象のモジュライ空間のと関連づけた。

## ●誌上发表 Publication

(原著論文)

Genki Ouchi, On entropy of spherical twists, with an appendix by Arend Bayer, Proceedings of the American Mathematical Society, DOI: <https://doi.org/10.1090/proc/14762> (Published electronically)

## ●口頭発表 Oral Presentation

Genki Ouchi, Derived categories of K3 surfaces, abelian surfaces and symplectic resolutions, Japanese-European Symposium on symplectic varieties and moduli spaces, ETS-Zurich, Switzerland, June 3-7, 2019.

Genki Ouchi, Derived categories of K3 surfaces, abelian surfaces and symplectic resolutions, Interaction between Algebraic Geometry and QFT, Moscow institute of physics and technology, June 24-28, 2019.

Genki Ouchi, Automorphism groups of cubic fourfolds and K3 categories, Tokyo-Seoul Conference 2019, university of Tokyo, November 29, 2019.

## Research on Relative Theory of Algebraic Cycles and Algebraic K-theory

研究者氏名: 宮崎 弘安 Miyazaki Hiroyasu

受入研究室: 数理創造プログラム

(所属長 初田 哲男)

数論幾何という数学分野に属するモチーフ理論について研究している。数論幾何の主要な研究対象は、

多項式関数の零点集合を素朴な例とする代数多様体である。通常の高次元の多様体の理論と同様に、代数多様体

に対しても (コ) ホモロジーと呼ばれる線形空間 (あるいはより一般に、アーベル群) を対応させることができる。コホモロジーは代数多様体の幾何的なデータを線形代数的なデータとして抽出可能にしてくれる便利な道具である。

一口にコホモロジーといっても、目的用途に応じて様々なコホモロジーが考案されている。代表的な例としては、1進エタールコホモロジー、ドラムコホモロジー、クリスタリコホモロジーなどがある。面白いことに、役に立つコホモロジーは、ポアンカレ双対性やキュネット公式などの共通の性質を示す。こうした事実に触発されたグロタンディークは、「良いコホモロジーはことごとく普遍的な1つのコホモロジー理論の投影として得られるのではないか」という哲学を発表し、その (存在するか不明の) 普遍的なコホモロジーを「モチーフ」と名付けた。その後ベイリンソンによりモチーフの哲学は数学的な公理として定式化された。そして、ヴォエヴォドスキーはベイリンソンの公理を部分的に満足するような理論を構築することに成功した。これを混合モチーフ理論という。混合モチーフ理論はミルナー予想の解決などの華々しい成果をもたらし、ヴォエヴォドスキーのフィールズ賞の受賞理由となった。

しかし混合モチーフの理論は数論幾何への応用を考えた時、深刻な弱点を持つ。ヴォエヴォドスキーは、古典的なホモトピー不変性の類似であるA1ホモトピー不変性を代数多様体に課すことでモチーフを構築したのだが、このことにより混合モチーフはA1ホモトピー不変性を満たすコホモロジーしか原理的に統制できない。これは代数多様体のwildなデータ、あるいはp-進的なデータを捨て去ることを意味する。

本研究ではヴォエヴォドスキーの混合モチーフ理論を適切にアップデートすることにより、p-進的なデータをも統制するモチーフ理論を構築し、代数的サイクル (から定まるコホモロジー理論) と代数的K-理論に応用することを目指している。本年度はA1ホモトピー不変性を用いない、混合モチーフ理論の一般化である「混合モチーフ理論」を構築することに成功し、その一部を4本のプレプリントにまとめて公開した (arXiv:1910.14579, arXiv:1910.14595, arXiv:1908.02975, arXiv:1910.14534)。

### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

H. Miyazaki: “Cube invariance of higher Chow groups with modulus”, *J. Algebraic Geom.*, 28 (2019).

### ●口頭発表 Oral Presentations

H. Miyazaki : “On motives with modulus”, *Mathematics - String theory Seminar, Kavli IPMU, January (2020).*

H. Miyazaki : “Topologies on modulus pairs and relation with Nisnevich topology”, “Modulus Day”, *University of Milan, Italy, November (2019).*

H. Miyazaki : “On algebraic cycles with modulus”, *Boston University - Keio University Workshop 2019 (Number Theory), Boston University, June (2019)*

H. Miyazaki : “Homotopy property for algebraic cycles with modulus”, *Algebraic Geometry Seminar, KAIST, Republic of Korea, June (2019).*

H. Miyazaki : “Mayer-Vietoris squares for motives with modulus”, *International Workshop Motives in Tokyo 2019 (University of Tokyo, Japan, February (2019)*

XVIII-003

## 位相空間のトポロジーを用いた異常輸送現象の研究 Anomalous transport phenomena on the basis of the phase-space topological field theory

研究者氏名: 早田 智也 Tomoya Hayata  
受入研究室: 仁科加速器科学研究センター  
量子ハドロン物理学研究室  
(所属長 初田 哲男)

カイラル輸送現象と呼ばれる物質のカイラリティに起因する異常電気磁氣的応答が、近年、物性物理

から、素粒子物理、宇宙物理まで非常に広い分野で精力的に研究されている。カイラル磁気効果に代表されるこれらの異常電気磁気的応答は、粒子のカイラリティに由来する波動関数のトポロジー（Berry曲率）と電磁場を引数とした位相空間上の位相的な場の理論（Chern-Simons理論）を用いて統一的に記述することができる。本研究は、位相空間上のトポロジカルな場の理論を曲がった時空上へ拡張し、電磁気的な応答に限らず、物質の力学的変形に伴う有効的な重力場（加速や膨張、回転、物質の歪み（strain）、欠陥、温度勾配等）によって誘起される異常輸送現象や、電気磁気効果等の異常応答を統一的に記述する理論の構築を行った。

本年度は、一般相対論的な重力場を外場とした曲がった時空上のカイラルなフェルミオンの運動論から、重力場の曲率（リッチテンソル）により誘起される異常輸送効果の計算と簡単な現象論的应用を行った。

(1) 曲がった時空上のカイラル運動論を構築し、温度勾配や回転などの有効重力場により誘起される異常電流、異常軸性電流（異常スピン流）の計算を行った。有効的に重力のリーマン曲率を用いて表されるスピネルンスト効果を発見し、そのスピントロ

ニクスおよび重イオン衝突実験への応用を議論した。

(2) 渦やドメインウォール、モノポール等のトポロジカル欠陥やブレーンといった広がりのある物体が持つ対称性をゲージ化させ、トポロジカル欠陥の間に働く量子効果による力を格子シミュレーションを用いて計算する手法を構築した。点粒子の世界線に通常の1形式ゲージ場が作用する（ $\int dx_\mu A^\mu$ ）ように、渦糸の世界面には2形式ゲージ場（カルブーラモン場）を作用させることができる（ $\int d\Sigma_{\mu\nu} B^{\mu\nu}$ ）。この2形式ゲージ場をダイナミカルにすることで、渦糸間の相互作用を記述するゲージ理論を与えることができる。U(1)ヒッグス模型と双対の関係にある可換な2形式ゲージ場（カルブーラモン場）の格子ゲージ理論において渦糸-反渦糸間のポテンシャルのモンテカルロシミュレーションを行い、渦糸の閉じ込め-非閉じ込め相転移を解析した。

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

Hayata T., “Nambu-Goldstone modes in time-periodic condensates”, Effective Theories of Quantum Phases of Matter, Nordita, Sweden, May (2019)

## XVIII-004

### The N-body problem in astrophysics

Name: David HERNANDEZ

Host Laboratory: Particle simulator research team

Center for Computational Science

Laboratory Head: Junichiro MAKINO

I completed two projects while at RIKEN since March 1, 2019, which I will describe. They are both related to N-body symplectic integration. The N-body problem describes N point particles interacting through pairwise forces. In our case, the pairwise force is Newtonian gravity. Newtonian gravity is long-range, meaning particles far away impact the dynamics of any given particle. It also has no scale, so it can act on long or short time or distance scales. This problem has no analytic solution, but it describes a wide range of dynamics: galaxies, planetary systems, or stellar clusters are all N-body problems at lowest approximation. To understand these systems, we need to be able to evolve

them over their dynamical timescales. Numerical integrators provide a tool to evolve these systems, but they suffer from varieties of error. Symplectic integrators control some of this error. Typically, symplectic integrators show no energy error drift in time so that the error is bounded. Thus, symplectic integrators have become the default tool for exploring a wide range of dynamical phenomena.

In my first project I explored whether Nbody integrators should always be symplectic. If we just break symplecticity at one point in phase space, will the accuracy of its solutions become secularly worse, or is it OK to allow this? This has important implications for codes,

because they are usually not exactly symplectic. I found that by just breaking symplecticity at one point in phase space, the performance degraded significantly. I investigated this for regular orbits where chaos does not exist (the Kepler problem, the simple harmonic oscillator) and in a subsequent project, I investigated this issue for chaotic orbits. Again, enforcing symplecticity

was important for the accuracy of the orbits. Another important issue for Nbody orbits is the differentiability class order of the Hamiltonians the integrators are derived from. This should be as close to infinite as possible.

My work will help in the solution of dynamics problems in astrophysics over long timescales.

## XVIII-005 高分解能宇宙論的シミュレーションから探る球状星団の形成進化 Formation and Evolution of Globular Clusters in High-Resolution Cosmological Simulations

研究者氏名: 平居 悠 Yutaka Hirai  
受入研究室: 計算科学研究センター  
粒子系シミュレータ研究チーム  
(所属長 牧野 淳一郎)

天の川銀河の周囲には多くの球状星団や矮小銀河が存在する。近年の観測により、過去に合体した矮小銀河や球状星団が現在の天の川銀河の一部をなしている可能性が示唆されている。これらの天体の形成進化史を明らかにすることは、天の川銀河の初期進化史を理解する鍵となる。本年度は、以下の課題について取り組んだ。

### (1) 矮小銀河におけるストロンチウム汚染史

ストロンチウムは軽い中性子捕獲元素の代表例である。高分散分光観測により矮小銀河や球状星団において、ストロンチウムの元素量にばらつきがあることが示唆されている。これまでの元素合成計算により、電子捕獲型超新星爆発、連星中性子星合体、漸近巨星分枝星、回転大質量星でストロンチウムが合成されることが示されている。しかし、これらの天体のストロンチウム汚染史に対する寄与は不明である。本研究では、これらの天体のモデルを導入した銀河のシミュレーションを行った。その結果、矮小銀河のストロンチウム量を説明するには、連星中性子星合体・漸近巨星分枝星のみでは不十分で、電子捕獲型超新星爆発、回転大質量星の寄与が必要になることが明らかになった。本研究成果はRIKEN ResearchにResearch Highlightとして掲載された。

### (2) 星団における初期質量関数

スーパーコンピュータ「富岳」では、個々の星まで分解する超高分解能銀河形成シミュレーションを実施する予定である。そのためには、星形成過程の

適切なモデル化が必要である。本研究では、新たに開発した星形成モデルを用いて星団形成の計算を行った。その結果、星団内で大質量星を形成させるには、星形成領域の密度から見積もられる範囲より広い領域からガスを集めて星を形成させる必要があることが明らかになった。

### (3) 天の川銀河形成シミュレーション

天の川銀河形成史とその周囲に存在する球状星団・矮小銀河の関係を明らかにするためには、宇宙論的な天の川銀河形成シミュレーションを行う必要がある。今年度は、異なる3つの分解能と初期条件で天の川銀河と同程度の質量を持つ銀河の宇宙論的ズームインシミュレーションを行った。これにより、 $r$ プロセスと呼ばれる元素合成過程で合成される元素に富んだ星は、銀河円盤にある星と異なる軌道を持つ傾向にあることが示唆された。

## ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Hirai Y., Wanajo S., and Saitoh T. R.: “Enrichment of Strontium in Dwarf Galaxies”, *The Astrophysical Journal*, 885, 33 (2019)\*

Hirai Y., Wanajo S., and Saitoh T. R.: “Enrichment of Heavy Elements in Chemodynamical Evolution of Dwarf Galaxies”, *JPS Conference Proceedings*, 31, 011009 (2020)\*

(図書)

Hirai Y.: “Understanding the enrichment of heavy elements by the chemodynamical evolution models of dwarf galaxies”, Springer Theses, ISBN: 978-981-13-7883-6, Springer Nature (2019)

(その他)

Hirai Y., Saitoh T. R., Wanajo S. and Fujii M.S.: “Enrichment of Heavy Elements in Chemo-Dynamical Simulations of Dwarf Galaxies”, Proceedings of the International Astronomical Union, 14, 197-200 (2019)

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(招待講演)

平居悠: “銀河の化学進化とrプロセス”, 原子核物理でつむぐrプロセス, 京都, 5月 (2019)

平居悠: “Prospects for Simulations of Galaxy Formation”, 令和元年度国立天文台天文シミュレーションプロジェクトユーザーズミーティング, 三鷹, 1月 (2020)

(国際会議)

Hirai Y., Wanajo S and Saitoh, T. R.: “Enrichment of

Heavy Elements in Chemodynamical Evolution Models”, The 15<sup>th</sup> International Symposium on Origin of Matter and Evolution of Galaxies, Kyoto, Japan, Jul. (2019)

Hirai Y.: “Chemo-dynamical evolution of the Local Group galaxies”, JINA-CEE IReNA/NAOJ workshop, Mitaka, Japan, Dec. (2019)

(国内会議)

平居悠: “Enrichment of Heavy Elements in Local Group Galaxies”, 6<sup>th</sup> Galaxy Evolution Workshop, 柏, 6月 (2019)

平居悠, 藤井通子, 斎藤貴之: “個々の星を分解した銀河スケールシミュレーションに向けた星形成モデル構築”, 日本天文学会2020年春季年会, 筑波, 3月 (2020)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

平居悠: “銀河の化学動力学進化シミュレーションから探る中性子捕獲元素の起源と進化”, 第32回理論懇シンポジウム, 三鷹, 12月 (2019)

### XVIII-006 量子もつれによる量子重力理論、及び、熱化の機構の解明に向けた研究

#### The study on quantum gravity and thermalization in terms of quantum entanglement

研究者氏名: 野崎 雅弘 Masahiro Nozaki  
受入研究室: 数理創造プログラム (iTHEMS)  
(所属長 初田 哲男)

熱化・量子カオスの両現象において共通する現象として初期状態の情報が時間経過に伴い、局所的には失われてしまう情報のスクランプリングがある。この現象は熱化・量子カオスの両現象の根源となる現象であり、系のダイナミクスに大きく依存している。一方で、非常に小さなスケールの状態の時間変化は時間発展演算子によって支配されており、系が熱化・量子カオスの現象を引き起こすかどうかは、系の初期状態とダイナミクスによっている。今年度は、系のダイナミクスに注目し、どの様なダイナミクスであれば系の熱化・量子カオスを引き起こすのか調べるために次の研究を行なった。

(1) 我々は演算子に対する量子もつれという概念に基づいて、演算子の量子もつれを調べ初期状態の

情報がダイナミクスによって局所的に取り出せなくなってしまうかを定量的に調べた。本研究はスクランプリングによって局所的に初期状態の情報がどれほど取り出せなくなってしまうかを無限自由度の系である場の理論において初めて定量的に調べた研究である。本研究により、重力双対を持つ場の理論では強いスクランプリングの効果で、十分に時間が経つと局所的には情報が取り出せなくなってしまうことを見出し、これを論文として発刊した。また、相互情報量と対数的ネガエントロピーについても調べ、これらの量の動的な系における振る舞いの違いを調べ、論文として発刊した。

ホログラフィー原理に基づいて、量子重力理論を理解する上でこれまで知られていない系での対応を

理解することも有益である。これまでは一様等方な場の理論に対応する重力理論は調べられていたが、より一般的な非一様な場の理論に対応する重力理論は調べられていなかった。

(1) 非一様な場の理論に双対な重力理論を調べ、また、この重力解を用いて非一様な場の理論におけるエンタングルメント・エントロピーの性質を調べ、これを論文として刊行した。

これまで調べられてこなかった非相対論的な場の理論における系のダイナミクスを調べた。

(1) 非相対論的な場の理論にであるリフシツツ型の理論でエンタングルメント・エントロピーの性質をスムーズクエンチで調べて、これを論文として発刊した。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Quantum vs. classical information: operator negativity as a probe of scrambling, Kudler-Flam J., Nozaki M.,

Ryu S., Tian Tan M.. JHEP 2001 (2020) 031

Entanglement after Quantum Quenches in Lifshitz Scalar Theories Kim K., Nishida M., Nozaki M., Seo M, Sugimoto Y., Tomiya A.. J.Stat.Mech. 1909 (2019) no.9, 093104

Signature of quantum chaos in operator entanglement in 2d CFTs, Nie L., Nozaki M., Ryu S., Tian Tan M.. J.Stat.Mech. 1909 (2019) no.9, 093107

Entanglement Spreading and Oscillation, Nishida M., Nozaki M., Sugimoto Y., Tomiya A.. J.Stat.Mech. 1905 (2019) no.5, 053102

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(国際研究会)

Nozaki M., Nie L., Ryu S., and Tian Tan M.: “Signature of quantum chaos in operator entanglement in 2d CFTs”, Quantum Information and String Theory 2019, Kyoto, Japan, Jun.(2019)

## XVIII-007

### Ia型超新星の多様性の解明と銀河団の超精密X線分光で迫る宇宙の化学進化

#### Revealing the diversity of type Ia supernovae and chemical evolution of the Universe approaching by ultra precision X-ray spectroscopy

研究者氏名: 佐藤 寿紀 Sato Toshiki

受入研究室: 開拓研究本部

玉川高エネルギー宇宙物理研究室

(所属長 玉川 徹)

Ia型超新星は、白色矮星がチャンドラセカール質量(1.4太陽質量)に近づいた時に起こる核暴走爆発と考えられている。本研究ではこの爆発の多様性を観測的に理解し、それが宇宙の化学進化(元素合成歴)にどのような影響を与えているかを明らかにする事が目的である。主にIa型超新星残骸の観測研究と将来の超精密X線分光観測を目指したX線望遠鏡製作をすることで課題を遂行する。

本年度の観測研究においては、X線輝線のドップラー効果を捉えることでケプラーの超新星残骸の非対称な膨張構造を初めて示し、原著論文としてまとめた(Kasuga, Sato+18誌上発表1. 口頭発表2. ポスター発表2.)。同様に、Chandra衛星のグレーティング観測によって、更にこの天体の高精度な膨張速

度の測定に成功した(口頭発表4.)。これらの結果は、爆発時の環境や爆発自体の非対称な形状を示唆しており、典型的なIa型超新星の残骸とされているテイコの超新星残骸とは異なる性質を示している。この天体のさらなる理解に向け来期AO-18のXMM-Newtonの長期間の観測提案(200 ksec)を行い採択された。またIa型超新星残骸に見られる「塊構造」の形成過程について、そのトポロジ的な性質に着目し、「ジーナス統計」を用いた研究を開始した。これによって、塊構造はどうか爆発直後にはすでに存在していた事がわかり始め、ジーナス統計が爆発時の情報を得るための新たなツールとなりつつある(ポスター発表1.)。

X線望遠鏡の開発研究においては、NASA/GSFC

にて長期滞在研究を行い、Kirkpatrick-Baez ミラーを用いた新型の X 線望遠鏡の設計・製作を開始した。この技術によって、軽量かつ高角度分解能（～15 角度程度）の望遠鏡が期待できる。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

1. Tomoaki Kasuga, Toshiki Sato, Koji Mori, Hiroya Yamaguchi and Aya Bamba: “Asymmetric Expansion of the Fe ejecta in Kepler’s Supernova Remnant”, Publ. Astron. Soc. Japan, Volume 70, Issue 5, id.88 (2018)
2. Federico Fraschetti, Satoru Katsuda, Toshiki Sato, J. R. Jokipii and Joe Giacalone: “Vortical Amplification of the Magnetic Field at an Inward Shock of Supernova Remnant Cassiopeia A”, Physical Review Letters, 120, 251101 (2018)

#### ●口頭発表 Oral Presentations

1. Toshiki Sato : “Kinematical Asymmetries and Their Interpretations in Kepler’s Supernova Remnant and Cassiopeia A”, Shocking Supernovae: surrounding interactions and unusual events, Stockholm, 5/28-6/1 (2018)
2. Tomoaki Kasuga, Toshiki Sato, Koji Mori, Hiroya

Yamaguchi and Aya Bamba: “Asymmetric Expansion of the Fe ejecta in Kepler’s Supernova Remnant”, SNR Workshop 2018, Nagoya, 10/9-10 (2018)

3. 武尾 舞, 中庭 望, 浅井 龍太, 大橋 隆哉, 石田 學, 前田 良知, 佐藤 寿紀: “Pt/C 多層膜ブラッグ反射による低エネルギー X 線用分光器の開発と X 線測定環境での実用化”, 天文学会 秋季年会, (2018)
4. Matthew J. Millard, Jayant Bhalerao, Sangwook Park, Toshiki Sato, John P. Hughes, Patrick Slane, Daniel Patnaude, Davide Burrows and Carlos Badenes: “A High-Resolution X-ray Kinematics Study of Kepler’s Supernova Remnant”, 233<sup>rd</sup> AAS meeting, USA, 1/6-10 (2019)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

1. Tomoaki Kasuga, Toshiki Sato, Koji Mori, Hiroya Yamaguchi and Aya Bamba: “Asymmetric Expansion of the Fe ejecta in Kepler’s Supernova Remnant”, High Energy Astrophysics 2018, Tokyo, 9/5-7 (2018)
2. 佐藤 寿紀, 森井 幹雄, Brian Williams, John Hughes: “ジーナス統計で迫る Ia 型超新星残骸内の塊構造の形成過程”, 天文学会 春季年会, (2019 予定)

## XVIII-008

### 将来の加速器実験に向けての格子 QCD 技術の開発

#### Development of new techniques in lattice QCD for future colliders

研究者氏名: 富谷 昭夫 Tomiya Akio  
受入研究室: 仁科加速器研究センター  
理研 BNL 研究センター  
計算物理研究グループ  
(所属長 出淵 卓)

今年度は前年度から引き続き、研究テーマである機械学習を用いて格子 QCD の技術革新につながる研究を行っている。格子 QCD ではモンテカルロ法を用いてゲージ配位を生成し、そこから核力やカイラル対称性の自発的破れに関する演算子の期待値を求める。2019 年度はゲージ理論に応用しその効果を検証した。具体的には、自己学習モンテカルロ法と熱浴法を組み合わせた新アルゴリズムを調べている。自己学習モンテカルロ法は、物性理論で使われ

始めたアルゴリズムであり効果が確認されている機械学習の手法である。現在までに GAN (Generative adversarial neural networks) などで始められている類似する研究とは異なり、収束することが保証されているため次世代のアルゴリズムの候補となりえる。一方で量子計算をもちいた符号問題の解決に関する研究もスタートした。符号問題は、格子 QCD の数値計算における最大の問題である。量子コンピュータを用いるとハミルトニアン形式で計算が進め

られ、符号問題を生じない。現在までにQCDのトイモデルである2次元QEDで厳密計算と一致する結果をえた。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Keun-Young Kim, Mitsuhiro Nishida, Masahiro Nozaki, Minsik Seo, Yuji Sugimoto, Akio Tomiya: “Entanglement after Quantum Quenches in Lifshitz Scalar Theories”, J.Stat.Mech,1909 (2019)

Kouji Kashiwa, Yuta Kikuchi, Akio Tomiya: “Phase transition encoded in neural network”, PTEP, 8(2019)

#### ●口頭発表 Oral Presentations

Akio Tomiya: “An introduction to deep learning (lecture)”, Jamstec (Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology), January (2020)

Akio Tomiya: “An introduction to lattice gauge theories (lecture)”, Math club, Tokyo, December (2019)

Akio Tomiya: “An introduction to deep learning (lecture)”, Kochi Technological university, Kochi, Japan, December (2019)

Akio Tomiya: “An introduction to Machine learning and science (lecture)”, Kochi Technological university, Kochi, Japan, December (2019)

Akio Tomiya: “Chiral condensate in Schwinger model

by quantum computer”, International Workshop on “Theoretical Particle Physics 2019”, Tokyo, Japan, November (2019)

Akio Tomiya: “An introduction to lattice gauge theories (lecture)”, Jilin U, China, November (2019)

Akio Tomiya: “An introduction to deep learning (lecture)”, Waseda U (hpc-phys working group), Japan, November (2019)

Akio Tomiya: “Phase transition in three flavor QCD with background magnetic field”, Jilin U, China, September (2019)

Akio Tomiya: “Phase transition in three flavor QCD with background magnetic field”, Keio, Japan, July (2019)

Akio Tomiya: “Phase structure of three flavor QCD in external magnetic fields”, XQCD 2019, Tokyo, Japan, June (2019)

Akio Tomiya: “Phase structure of three flavor QCD in external magnetic fields”, Lattice 2019, Wuhan, China, June (2019)

Akio Tomiya: “Applications of machine learning to computational physics, Brookhaven National Laboratory, NY, US”, May (2019)

Akio Tomiya: “Phase structure of three flavor QCD in external magnetic fields”, RBRC Scientific Review Committee Meeting, Brookhaven National Laboratory, USA, March (2019)

XVIII-009

### 初期宇宙における宇宙網を舞台とした銀河進化の解明

#### Galaxy Evolution along Cosmic Web in the Early Universe

研究者氏名: 梅畑 豪紀 Hideki Umehata

受入研究室: 開拓研究本部

坂井星・惑星形成研究室

(所属長 坂井 南美)

現在の標準的な宇宙モデルでは、バリオンの大部分は銀河ではなく宇宙網 (Cosmic Web) と呼ばれる蜘蛛の巣状の構造に沿って分布していると予想されている。これらの銀河と銀河を繋ぐ銀河間物質 (Intergalactic Mediums, IGM) は、宇宙の構造形成、あるいは銀河進化を理解する上で欠かせない要素である。一方でガス密度の希薄さなどの要因によってその表面輝度は極めて低いと予想されており、その

観測は非常に難しく、研究があまり進んでいない。本研究では、赤方偏移3.1 (115億年前の宇宙に相当) の原始銀河団を対象とし、これまで主に理論的に予想されてきたこのような銀河間物質のネットワークである宇宙網の世界初の三次元撮像の実現を目指す。さらに宇宙網を舞台としてどのように銀河がそのガスを獲得して成長していったのか、マルチスケールでの銀河進化の解明に挑む。



本年度も引き続きミリ波サブミリ波を担うアルマ望遠鏡、可視光の装置であるVLT望遠鏡、それぞれにおいて観測と解析を推進した。

(1) 当初の目的であったガスネットワークの検出をサイエンス誌にて報告、出版した。

(2) ガスネットワーク、銀河それぞれについて新しいデータの取得も行なった。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Umehata, H., Fumagalli, M., Smail, I., Matsuda, Y., Swinbank, A. M., Cantalupo, S., Sykes, C., Ivison, R. J., Steidel, C. C., Shapley, A. E., Vernet, J., Yamada, T., Tamura, Y., Kubo, M., Nakanishi, K., Kajisawa, M., Hatsukade, B., Kohno, K., “Gas filaments of the cosmic web located around active galaxies in a protocluster”, *Science*, 366, 6461, pp97-100, 2019

#### ●口頭発表 Oral Presentations

Umehata, H.; “Active dust-obscured star-formation at a  $z=3$  proto-cluster”, IAU Symposium 352 Uncover-

ing early galaxy evolution in the ALMA and JWST era, Viana de Castelo, Portugal, Jun. (2019)

Umehata, H.; “ngVLA and galaxy formation in proto-clusters”, ngVLA Workshop, Tokyo, Japan, Sep. (2019)

Umehata, H.; “Gas filaments connecting galaxies and supermassive black holes in a proto-cluster”, Subaru Telescope 20th Anniversary, Waikoloa, USA, Dec. (2019)

梅畑豪紀: “Massive Galaxies and surrounding matters at a  $z=3$  proto-cluster”, 輝線 Intensity Mapping 研究会 2018, 三鷹, 7月 (2018)

梅畑豪紀: “gas filaments at  $z=3$  revealed by MUSE”, 面分光研究会 2019, 三鷹, 10月 (2019)

梅畑豪紀: “赤方偏移3の宇宙網における銀河形成研究の現在地”, つくば宇宙フォーラム, 筑波, 12月 (2019)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

Umehata, H.; “ALMA Deep Field in the SSA22 proto-cluster at  $z=3$ ”, ALMA2019: Science Results and Cross-Facility Synergies, Cagliari, Italy, Oct. (2019)

## XVIII-010

### データ同化を応用した過去千年の高精度な気候復元 High-Precision Climate Reconstruction Over Last Millennium Using Data Assimilation

研究者氏名: 岡崎 淳史 Atsushi Okazaki  
受入研究室: 計算科学研究センター  
データ同化研究チーム  
(所属長 三好 建正)

本研究は、高度なデータ同化技術を応用することで、これまでになく精度で過去千年の気候変動を復元することを目指す。本研究では、観測情報と物理法則を最大限活用する古気候データ同化システムを開発し、計算科学研究センターが有する計算力を十分に活かすことで、高精度な古気候復元を実現する。さらに、古気候復元精度のさらなる向上に向けた情報を創生し公開することで、今後の古気候研究の発展に努める。本研究は、過去千年にわたる再解析プロジェクト、すなわち長期間に及ぶ大気及び地表の様々な物理量の3次元分布を、年々変動以上のできるだけ細かい時間解像度で提供するものである。こ

れによって、温暖化予測モデルの長期検証や、気候システムそのものの理解が発展することが期待され、温暖化の影響が懸念される現代では、学術的および社会的に価値のある研究であるといえる。

本年度はオフラインデータ同化手法の高度化に着手した。具体的には、Running-In-Place (RIP) を実装し、これを評価した。RIPは、数値天気予報において、データ同化サイクルを開始してから誤差が十分に小さくなるまでのスピニング時間を短くするために提案された手法である。通常データ同化では同じ観測は一度しか同化しないが、RIPは複数回同化する。予報アンサンブルが十分に観測に拘束

されていない場合に有効な手法であり、海面水温のみで大気を拘束するAMIP型ランで構成されたアンサンブルを用いるオフラインデータ同化には有効であると期待できる。昨年度に引き続き、大気モデルには簡易気候モデルであるSPEEDYを用い、データ同化手法にはアンサンブルカルマンフィルタ(EnKF)を用いた。観測はPAGEs(2013)の観測分布を模した地表気温の年平均値である。RIPを用いた結果、地表気温の二乗平均平方根誤差(RMSE)が約4%減少し、空間パターンのアノマリ相関(ACC)が0.55から0.63に改善した。また、RMSE/ACCが最小/最大になるのに要する繰り返し同化回数は7回/6回であった。観測誤差に対する感度、およびEnKFが想定する「観測誤差の誤差」に対する感度を調査したところ、得られる改善率や必要な繰り返し同化回数は変化するものの、改善傾向は共通して見られた。RIPは、オフラインデータ同化の精度をロバストに改善する手法であると言えるだろう。一方、モデルにバイアスがある場合、RIP

によりACCの悪化が観察されたため、モデルバイアス補正は必須であることも示唆された。

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

岡崎淳史, 本田匠, 小槻峻司, James Taylor, 三好建正, 静止衛星による降水観測が台風予測に与えるインパクト評価, データ同化手法を活用した観測システムの影響評価に関する研究会, JAMSTEC 横浜研究所, 4月(2019)

岡崎淳史, 本田匠, 小槻峻司, 三好建正, 次世代静止衛星搭載降水レーダ反射強度の観測システムシミュレーション実験, 日本気象学会2019年度春季大会, 東京, 5月(2019)

Okazaki, A., Isotope-enabled climate modeling and simulations: state of the art, next steps, Data Assimilation, Reanalyses and Proxy System Modeling in Paleoenvironmental Science, UMD, US, May (2019).

### XVIII-011

#### ベクトル中間子の核内質量分布の高統計測定による ハドロン質量の起源の解明

#### Measurements of Spectral Change of Vector Mesons in Nuclei

研究者氏名: 菅野 光樹 Koki Kanno  
受入研究室: 仁科加速器科学研究センター  
放射線研究室  
(所属長 延與 秀人)

本研究の目的は、ハドロンの質量がハドロンの周囲の媒質との関係で決定される動的な性質であることを実験的に示すために、ベクトル中間子の原子核内の質量分布と真空中での質量分布を測定し、その差を明確に測定することである。

一般的なクォーク模型において陽子は3つのクォークから構成されるが、その質量(938 MeV)は単体のクォークがヒッグス機構によって得る質量の単純和(数MeV)と比較して非常に重い。これはカイラル対称性の自発的破れという機構で理解され、広く受け入れられている。しかしこの機構を直接的に実証した実験は皆無である。そこで本研究では中間子の質量分布を直接測定することで、質量の起源を解明する。

本研究では原子核内で崩壊するベクトル中間子、

特に $\phi$ 中間子の質量分布を電子陽電子対崩壊チャンネルから再構成することで測定する。 $\phi$ 中間子は陽子ビームを原子核標的に照射することで生成するが、同時に電子陽電子の背景事象となる荷電 $\pi$ 中間子が大量に生成され、検出器に入射する。明瞭な質量分布を測定するためには、大量の荷電 $\pi$ 中間子の中から電子陽電子を高効率かつ低誤認率で同定する必要がある。そのために、検出器としてハドロンプラインド検出器と呼ばれる電子同定用ガスチェレンコフ検出器の開発を進めてきた。

本年度はこれまでの検出器開発の知見をもとに、実機ハドロンプラインド検出器の製作を行った。検出器の基本的な構成要素の性能評価を行い、予定通りの性能を持つことがわかった。その上で、検出器を実験場所であるJ-PARCハドロン実験施設内に設

置した。本年度内末、あるいは来年度初めに実際の陽子ビームを用いて検出器の性能を確認する予定である。

#### ●誌上发表 Publications

(proceedings)

Sakiko Ashikaga et al, JPS Conf. Proc 26 (2019) 024005

### XVIII-012 Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy Investigation of 'Drumhead' Topological Surface States

Name: Christopher BUTLER

Host Laboratory: Emergent Phenomena Measurement Research Team  
RIKEN Center for Emergent Matter Science  
Laboratory Head: Tetsuo HANAGURI

The target of this project is to search for novel phenomena emerging from the enhanced density of state associated with peculiar drumhead surface states in topological 'nodal-line' semimetals. Such phenomena may include various density wave orders or even two-dimensional superconductivity. Materials which may host such a drumhead state even in the presence of spin-orbit coupling remain exceedingly rare. Few candidate materials have been proposed within the last year, and only one of these materials, namely  $\text{Co}_2\text{MnGa}$  has been experimentally demonstrated to host drumhead states. However, this material has a cubic structure (space group  $\text{Fm}\bar{3}\text{m}$ , rather than a layered structure which would be amenable to good crystal cleavage necessary for STM measurements. Another candidate material, for which there is not a concrete confirmation of whether it hosts a drumhead state is  $\text{CaAgP}$ . Crystals of this material have been stabilized, but the crystal sizes which have been achieved so far are still very small ( $\sim 0.3$  mm, or less, across the short axis of the crystal), which presents an experimental challenge for STM measurements. Hence, observation of drumhead surface states has not yet been achieved in this project, although there remain avenues to pursue. Experiments are being performed on the material  $\text{BaNiS}_2$ , which has properties overlapping with those of some materials which have been predicted host drumhead states, such as non-symmorphic symmetry ( $\text{P4/nmm}$  space group) and Dirac nodal lines. Quasiparticle interference and Landau level spectroscopy measurements have been successfully performed, along with *ab initio* calcula-

tions, in order to identify the momenta and energies of the Dirac nodal features in the band structure. The role of non-symmorphic symmetry in the fundamental scattering process underlying quasiparticle interference measurements may be of interest here.

Alongside the above measurements on  $\text{BaNiS}_2$ , progress has been made interpreting previous measurements on the correlated insulator  $1T\text{-TaS}_2$ . As well as determining the inter-layer stacking of the planar charge-density-wave layers, the impact of this stacking on the overall electronic properties was elucidated. This helps to understand the nature of the insulating ground state of this material - whether it is a Mott insulator or simple band insulator - and this is highly relevant to the recent discussions of whether  $1T\text{-TaS}_2$  hosts the elusive quantum spin liquid phase. The findings are also relevant to understanding this material's metal-insulator transitions. Notable progress has been made, within the last year, to understand the observation of a series of sharp, equally spaced tunneling conductance peaks in the upper Hubbard band. These are reasonably interpreted as a Franck-Condon series resulting from sequential tunneling of electrons from the STM tip to the surface, which in turn excites phonons corresponding to the amplitude mode of the CDW. The long life time of these injected electrons on the CDW lattice sites tempts us to recognize them as 'doublons', characteristic excitations of a Mott insulator.

A manuscript describing the inter-layer stacking in  $1T\text{-TaS}_2$ , and its consequences for the electronic structure, is under review (see below). Another manuscript

describing the observation of the Franck-Condon series of conductance peaks, and their interpretation, is in preparation.

#### ●Publications

Butler, C. J., Yoshida, M., Hanaguri, T. and Iwasa, Y.: “Mottness versus unit-cell doubling as the driver of the insulating state in  $1T\text{-TaS}_2$ .” arXiv:1908.08221 (2019), (under review, Nature Communications).

#### ●Oral presentations

International Conference

Butler, C. J., Yoshida, M., Hanaguri, T. and Iwasa, Y.: “Three-dimensional stacking of two-dimensional charge density waves in Mott insulating  $1T\text{-TaS}_2$ .”, IBS-RIKEN Joint Conference, IBS, Daejeon, Korea 2019, October 17-18.

Butler, C. J., Yoshida, M., Hanaguri, T. and Iwasa, Y.: “Mottness versus unit-cell doubling as the driver of the insulating state in  $1T\text{-TaS}_2$ .” Annual Meeting of the Physical Society of Taiwan, Pingtung, Taiwan 2020, February 5-7.

Butler, C. J., Yoshida, M., Hanaguri, T. and Iwasa, Y.: “Mottness versus unit-cell doubling as the driver of the insulating state in  $1T\text{-TaS}_2$ .” American Physical Society (APS) March Meeting, Denver, Colorado, USA 2020, March 2-6.

Conference

Butler, C. J., Yoshida, M., Hanaguri, T. and Iwasa, Y.: “Inter-Layer Correlations and Emergent Electronic

Excitations in  $1T\text{-TaS}_2$  Investigated Using STM.” CEMS Symposium on Emergent Quantum Materials, The University of Tokyo, Tokyo, Japan 2019 May 22-24.

Invited Oral Presentations

Butler, C. J., Yoshida, M., Hanaguri, T. and Iwasa, Y.: “Mott or Not? - An STM/S Investigation into the Nature of the Insulating Ground State of  $1T\text{-TaS}_2$ .” Invited Talk, Department of Physics, National Taiwan University, Taipei, Taiwan 2020, February 10.

Butler, C. J., Yoshida, M., Hanaguri, T. and Iwasa, Y.: “Mott or Not? - An STM/S Investigation into the Nature of the Insulating Ground State of  $1T\text{-TaS}_2$ .” Invited Colloquium Talk, Institute of Physics, Academia Sinica, Taipei, Taiwan 2020, February 11.

#### ●Poster presentations

International conference

Butler, C. J., Yoshida, M., Hanaguri, T. and Iwasa, Y.: “Inter-Layer Correlations and Emergent Electronic Excitations in  $1T\text{-TaS}_2$  Investigated Using STM.” A3 Foresight Meeting, Sogang University, Seoul, Korea 2019, June 30 - July 2.

Conference

Butler, C. J., Yoshida, M., Hanaguri, T. and Iwasa, Y.: “Spectroscopically Distinct Surfaces of the Three-Dimensional Charge Order in  $1T\text{-TaS}_2$ .” Strongly Correlated Electron Systems (SCES) 2019, Okayama, Japan 2019, September 24-28.

XVIII-013

### Coupled-wire construction法を応用した 量子臨界相および量子磁性相の研究

#### Theoretical Studies on Quantum Critical and Quantum Magnetic Phases by Coupled-Wire Construction Method

研究者氏名: 古谷 峻介 Furuya, Shunsuke  
受入研究室: 開拓研究本部  
古崎物性理論研究室  
(所属長 古崎 昭)

低次元量子磁性体における量子性と低次元性の相乗効果により生じる新奇な量子相の探索と理解を目的とし、主に量子スピン鎖が互いに結合して形成さ

れる量子スピン系を対象に研究を行っている。本研究では量子スピン鎖を基本構成要素とし、2次元や3次元の量子磁性相を構成し、実験における実現可

能性および既存の実験の微視的理解の醸成を目指した。研究成果は以下の2つに大別される。

(1) 1次元量子スピン系のトポロジカル相を特徴づける“秩序変数”として、Lieb-Schultz-Mattis (LSM) 演算子の期待値が有効であることが知られていた。最近、このLSM演算子の期待値が量子臨界点の直上で、系のサイズについて、無限サイズの極限でゼロに収束するスケーリング則を示すことが指摘されていた。本研究では、LSM演算子のスケーリング則が量子臨界点直上の有効場理論だけでは決まらず、量子臨界点を不安定化する摂動のうち最もくりこみ群的に有意なもので決まることを示した。系に対称性を条件として課すと量子臨界点まわりで最も有意な演算子が変わることがあるが、このような場合には上述のスケーリング則が変化することも示すことができた。したがって本研究により、LSM演算子の期待値が対称性に守られたトポロジカル相の分類と、対称性に守られた量子臨界相 [Furuya and Oshikawa, PRL (2017)] の分類の両方に重要な役割を果たすことが判明した。本研究は下記の原著論文リストの最初の2つにおいて発表されている。

(2) 本研究では前述のLSM演算子の議論をさらに拡張・深化させ、2次元量子スピン系においてもLSM演算子が量子相の分類に有効であることを示した。前述の研究によりLSM演算子は系に課される境界条件に依存することがわかった。バルクの量子相の性質は境界条件が対称性を守る限り、対称性には依らないと信じられているので、LSM演算子の境界条件依存性は一見して非物理的な振る舞いに見える。しかし実は、この依存性は系に内在する対称性の持つある種の大域的アノマリーの存在に対応している。本研究では、LSM演算子の境界条件依存性と系のアノマリーの関係性を示す興味深い例として、checkerboard上の2次元量子スピン系を議論

した。LSM演算子を用いた量子相の分類の議論が、既存の数値計算や、1次元量子スピン鎖が弱く結合した異方的極限などすべて整合することが確認できた。本研究はLSM演算子や対称性間の量子異常、系の境界条件との関係性について新たな視点を与えるものである。本研究は下記の原著論文リストの最後の論文において発表されている。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

- Nakamura M. and Furuya S. C.: “Extraction of topological information in Tomonaga-Luttinger liquids”, Phys. Rev. B, 99, 075128 (2019)
- Furuya S. C., and Nakamura M.: “Polarization amplitude near quantum critical points”, Phys. Rev. B, 99, 144426 (2019)
- Furuya S. C. and Horinouchi Y.: “Translation constraints on quantum phases with twisted boundary conditions”, Phys. Rev. B, 100, 174435 (2019)

#### ●口頭発表 Oral Presentations

- Furuya S. C.: “Resonant second-order optical responses in quantum magnets”, American Physical Society March meeting, Boston, USA, Mar..(2019)
- 古谷峻介: “スピララダー系の量子臨界点における polarization amplitude と Berry 位相”, 2019年日本物理学会秋季大会, 岐阜, 9月 (2019)
- Furuya S. C.: “Lieb-Schultz-Mattis twist operator near quantum critical points”, Trends in Theory of Correlated Materials (TTCM2019), Kyoto, Japan, Oct.(2019)
- 古谷峻介: “量子スピン鎖における磁場誘起 dimerization”, 第14回量子スピン系研究会, 秋田, 1月 (2020)

**幾何学的位相を有する系の動的応答の理論的研究**  
**Theoretical Study of Dynamical Responses of Systems**  
**with Geometric Phases**

研究者氏名: 関根 聡彦 Sekine, Akihiko  
 受入研究室: 創発物性科学研究センター  
 強相関理論研究グループ  
 (所属長 永長 直人)

近年、トポロジカルに非自明な金属相（トポロジカル金属）に関する研究が活発に行われている。このトポロジーは系に固有のものであり、一般的には系の電子のバンド構造（波動関数）から求められるBerry位相と呼ばれる幾何学的位相によって特徴づけることができる。このような特異な電子のバンド構造を有する系は、より広い意味ではBerry曲率（= Fermi面上の電子の波動関数に起因した運動量空間における“磁場”）を有する系として理解できる。実際に観測されている系として、三次元系ではWeyl半金属、二次元系では遷移金属ダイカルコゲナイドなどが挙げられる。電場・磁場・温度勾配といった外場中の電子の輸送現象に対してBerry曲率の存在がもたらす効果は“Berry位相効果”と呼ばれる。Berry位相効果を取り込んだ輸送係数の計算手法として、半古典波束ダイナミクスと半古典Boltzmann理論を組み合わせたものがこれまでに広く用いられてきた。この手法は現象論的な手法であり、微視的な不純物散乱の効果を正確に取り込むこと、そして磁場の高次の効果を正確に計算することは難しい。

そこで本研究では、上記の弱点を解決できる微視的な理論を開発すること、特に、温度勾配の存在下におけるBerry位相効果を正確に記述できる理論を開発することを目的とした。温度勾配は熱的なスカラーポテンシャルを導入することによって記述できることが古くから提案されていたが、ごく最近、熱的なベクトルポテンシャルによっても記述できることが提案された。本研究ではこの熱ベクトルポテンシャル理論を用いて、温度勾配・電場・磁場中の電子の密度行列のダイナミクスを記述する一般的な量子動力学方程式を導出した。この方程式を解くことにより、これらの外場の任意の次数に対する電子の密度行列の応答、すなわち任意の一電子観測量を計算できる。まず、本理論を一般的な微視的電子模型に適用することにより、温度勾配と磁場が平行

な場合における熱的なカイラル量子異常の一般的な表式を得た。さらに、この熱的なカイラル量子異常と通常の（平行な電磁場の場合の）カイラル量子異常との間に、Mottの関係式に類似する関係が成り立つことを明らかにした。また、Weyl半金属の2バンド模型における熱電伝導度および熱伝導度の表式を導出し、熱電伝導度については期待通りMottの関係式が成り立つが、熱伝導度についてはWiedemann-Franz則が破れていることを明らかにした。

●誌上発表 Publications

(原著論文)

Sekine, A. and Nagaosa, N.: “Tunable Charged Domain Wall from Topological Confinement in Nodal-Line Semimetals”, *Phys. Rev. B (Rapid Commun.)* 101, 081102-1-6 (2020)

Sekine, A. and Nagaosa, N.: “Quantum Kinetic Theory of Thermoelectric and Thermal Transport in a Magnetic Field”, *Phys. Rev. B* 101, 155204-1-17 (2020)

●口頭発表 Oral Presentations

(国際会議)

Sekine, A. and Nagaosa, N.: “Charged Domain Wall of Electric Polarizations in Topological Nodal-Line Semimetals”, 14th Asia-Pacific Physics Conference (APPC14), Kuching, Malaysia, November (2019)

(国内学会等)

関根聡彦, 永長直人: “Berry曲率を有する系における輸送現象を記述する温度勾配を含んだ量子動力学方程式の導出とその応用”, 日本物理学会第2019年秋季大会, 岐阜市, 9月 (2019)

●ポスター発表 Poster Presentations

(国際会議)

Sekine, A. and Nagaosa, N.: “Electrically Tunable Lo-

XVIII-015

非共線的な磁気構造におけるスピンホール効果  
Spin Hall Effect in Noncoplanar Spin Structures

研究者氏名: 横内 智行 Yokouchi Tomoyuki  
受入研究室: 創発物性科学研究センター  
量子ナノ磁性研究チーム  
(所属長 大谷 義近)

本研究は、スキルミオンと呼ばれる、次世代のデバイスへの応用が期待されている磁気構造の新たな機能性の開拓および制御方法の開発を目的としている。スキルミオンは多数のスピンが渦の様態に整列した、数十ナノメートルから数マイクロメートルの大きさの非共線的な磁気構造である。この構造は連続変形によって強磁性状態には変形できず、数学的に特殊なものである。そして、この特殊な構造に由来して従来のスピン構造には見られない物理現象が多く生じ、学術的に注目を集めている。さらに、スキルミオンはスピンと電荷の双方の自由度の工学的な利用を目指す「スピントロニクス」と呼ばれる分野においても注目を集めており、スキルミオンを用いた次世代のスピントロニクス素子の実現が期待されている。そこで、本研究ではスピントロニクスの観点から重要となるスキルミオンの新規機能性の開拓およびその制御方法の開発と微視的機構の解明を目指した。本年度は微細加工技術を用いて、スキルミオンが形成する物質をデバイス加工し、下記に記す二つの実験を行った。

一つ目として、金属積層膜においてスキルミオンが表面弾性波と呼ばれる、物質の表面を伝搬する音波によって形成できることを明らかにした。さらに、

その機構を解明するために系統的な表面弾性波の波長依存性やシミュレーションを行った。そして表面弾性波によるひずみが磁気弾性結合を通じてスピンと相互作用することでスキルミオンが形成することを明らかにした。従来のスキルミオンの生成には、主に電流が用いられており、ジュール発熱が生じるという欠点があった。一方で、今回の手法では、強誘電体上に作成した電極に電場を印加し逆圧電効果を通して表面弾性波を励起するため、ジュール発熱がほぼ無いという利点がある。

二つ目とし、スキルミオンを有するバルク試料を、収束イオンビームを用いてマイクロスケールのデバイスに加工することで、磁気構造の電流誘起ダイナミクスに付随する輸送現象の研究を行った。そして、磁気構造の幾何学的な性質に由来する新規輸送現象の観測に成功した。

●口頭発表 Oral Presentations

Yokouchi T., Sugimoto S., Rana B., Seki S., Ogawa N., Kasai S. and Otani Y.: “Creation of magnetic skyrmions by surface acoustic waves in Co/Pt/Ir trilayer films”, Joint European Magnetic Symposia, Uppsala, Sweden Aug. (2019)

光誘起相転移とコヒーレントフォノン・マグノン生成の  
ナノスケールイメージング

Coherent phonon/magnon generation driven by  
photoinduced phase transition

研究者氏名: 中村 飛鳥 Asuka Nakamura

受入研究室: 創発物性科学研究センター

電子状態スペクトロスコピー研究チーム

(所属長 石坂 香子)

コヒーレント音響フォノンはパルス光の照射により生成された格子歪みであり、物質中を音速で伝搬する。その際に誘電率の周期的な変調を引き起こしたり、熱・音などを輸送したりすることから、新規フォノンクス、フォトニクスデバイスとしての研究が盛んにおこなわれている。本研究では、ピコ秒、ナノメートルのスケールにおける物質の光応答を観測可能な時間分解電子顕微鏡を用いて単結晶シリコンにおけるコヒーレント音響フォノンのダイナミクスを明らかにした。

はじめに厚さ 200 nm 程度の Si 薄片を収束イオンビーム装置により作成し、その電子回折図形の時間変化を調べた。その結果、特定の指数の回折強度が周期約 50 ps 程度で振動することを見出した。このような回折強度の変化は昨年度測定した  $\text{VTe}_2$  に代表されるように様々な試料で観測されており、薄膜の表面垂直方向 (z 方向) へと原子が変位する弾性波の定在波として解釈されてきた。今回の Si の場合についても同様に縦波音響フォノンの定在波であると考えられる。

さらにこの Si 薄片試料に対し、収束イオンビーム装置により大きさ 100 nm 程度の穴を空ける加工を行った。この試料の明視野像の時間変化を測定したところ、穴を中心として放射状に伝搬する周期的なコントラストの変化を観測した。これは薄膜の表面並行方向へと伝搬する弾性波 (板並) が生成され

たことを意味している。ここで得られた弾性波の波数と振動数の関係を精査したところ、ここで生成された表面弾性波は主に 1 次の対称ラム波モード (S1 モード) であることが明らかになった。このような表面弾性波の起源を明らかにするため、有限要素法を用いて穴の開いた試料における光励起後の弾性波ダイナミクスのシミュレーションを行った。その結果、回折実験から明らかになった z 方向へと原子が変位する縦波弾性波を起源として、同一の周波数を持つ S1 モードが生成されることが明らかになった。今後はより複雑なパターンを Si 試料へと加工することにより、ナノメートル、ピコ秒スケールにおけるフォノンの制御を目指した研究を行っていく予定である。

●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

中村飛鳥, 下志万貴博, 千足勇介, 上谷学, 酒井英明, 石渡晋太郎, 李瀚, 押山淳, 石坂香子: “超高速電子顕微鏡による  $1T'$ - $\text{VTe}_2$  のコヒーレント音響フォノンの観測”, 日本電子顕微鏡学会第 75 回学術講演会, 名古屋, 6 月 (2019)

中村飛鳥, 下志万貴博, 石坂香子: “微細加工シリコン単結晶薄膜におけるコヒーレント音響フォノン”, 日本物理学会 2019 年秋季大会, 岐阜, 9 月 (2019)



## Observation of inverse optical magnetoelectric effect

研究者氏名: 豊田新悟 Shingo Toyoda  
 受入研究室: 創発物性科学研究センター  
 創発物性研究チーム  
 (所属長 小川直毅)

情報機器の増大に伴い、非熱的に高速で情報(磁化)を制御する方法が要請されている。そこで期待されているのが、超短パルス光による磁化制御である。具体的には円偏光照射によって磁化を制御する逆ファラデー効果が知られている。しかし円偏光照射には複数の偏光素子が必要でデバイスの小型化が困難という課題がある。これを解決するには無偏光照射によって磁化を制御できればよいが、一般に光誘起磁化の発現には円偏光が必要である。ところがマルチフェロイック物質においては、無偏光照射による磁化誘起が可能であることが予想されている。この現象は逆電気磁気光学効果と呼ばれ、実験的な報告例はまだない。

本研究ではポンププローブ分光法を用いて、逆電気磁気光学効果を検出することを目指している。具体的には、無偏光状態のポンプ光を入射することによって生じる磁化をプローブ光の透過率変化によって検出する。なお、ポンプ光の入射方向を逆転することによって、光誘起磁化の方向が反転することが予想される。対象物質の $\text{CuB}_2\text{O}_4$ では磁化方向の反転により光透過率が大きく変化するため、ポンプ光の入射方向を反転した際のプローブ光透過率変化の差を検出することで、逆電気磁気光学効果の観測が可能だと考えられる。しかし実験を進めた結果、ポンプ光とプローブ光が互いに逆向きに進行する場合には、試料内での透過率変化が時間平均され、観測できないという課題があることが判明した。薄い試料を用いればこの問題は解決されるが、今度は透過率変化が小さくなるという別の課題が生じる。そこで薄い試料を用いた場合でも磁化反転により大きな信号強度の変化が期待される現象をプローブに適用すれば良いと考え、今年度はそのような現象の探索を行った。具体的には、非相反な第二次高調波発生(SHG)の研究を行った。非相反SHGは磁化の反転に伴いSHG強度が変化する現象のことである。これは磁気双極子遷移と電気双極子遷移の干渉によって生じるため、両者の大きさが同程度の時に巨大化

するが、一般的に電気双極子遷移の方が圧倒的に大きい。この課題を解決するために、共鳴磁気双極子遷移を用いれば磁気双極子が増強され、電気双極子遷移と同程度の大きさを持つと考えた。実験の結果、 $\text{Cu}^{2+}$ イオンのd-d遷移に対応する磁気共鳴においてSHG強度が97%も変化する巨大非相反SHGの観測に成功した。非相反SHGは試料の厚さに関係なく、磁化反転に伴い大きな信号変化が観測される。来年度は本研究で発見した巨大非相反SHGをプローブとして逆電気磁気光学効果の検出を試みる。

## ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Toyoda S., Abe N. and Arima T.: “Nonreciprocal refraction of light in a magnetoelectric material”, *Physical Review Letters* 123, 077401 (2019)\* (Editors’ suggestion)

## ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

Toyoda S., Fiebig M., Arima T., Tokura Y. and Ogawa N.: “SHG-active boundaries between nonpolar magnetic domains in  $\text{MnWO}_4$ ”, *Materials Research Society Fall Meeting, Boston, USA, Dec. (2019)*

豊田新悟, M. Fiebig, 有馬孝尚, 十倉好紀, 小川直毅: “ $\text{MnWO}_4$ におけるSHG活性な磁壁の検出”, *日本物理学会2019年秋季大会, 岐阜, 9月 (2019)*

## ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

Toyoda S., Fiebig M., Arima T., Tokura Y. and Ogawa N.: “SHG-active boundaries between nonpolar magnetic domains in  $\text{MnWO}_4$ ”, *CEMS Symposium on Emergent Quantum Materials, Tokyo, Japan, May (2019)*

Toyoda S., Fiebig M., Arima T., Tokura Y. and Ogawa N.: “SHG-active boundaries between nonpolar mag-

XVIII-018

非一様磁化を持つ金属中の磁化振幅振動誘起電流の理論

Current generated by longitudinal modulation of spin textures with spin-orbit interaction

研究者氏名: 紅林 大地 Daichi Kurebayashi

受入研究室: 創発物性科学研究センター

強相関理論研究グループ

(所属長 永長 直人)

非一様磁気構造を持つ金属中において、磁化振幅の振動によって誘起される伝導現象の解析を行った。近年、実空間における幾何学的に非自明な磁気構造により生じる創発電磁場が引き起こす特異な伝導現象が注目を集めている。特に、創発磁場によって発現するトポロジカルホール効果や、磁気構造のダイナミクスにより生じるスピン起電力は理論面、実験面双方から多くの先行研究がなされている。また、非自明な磁気構造の代表例である磁気スカームイオンは、その位相幾何学的に非自明なスピン配置に因る熱安定性や、高密度化が可能である点などの利点から低消費電力磁気メモリーなどへの応用の観点からも注目されている。これらのことから、非自明な磁気構造に起因した伝導現象を理解することは重要な課題の一つである。一方で、多くの先行研究では、低温領域で磁化の大きさが一定である状況を考え、磁化の方向ベクトルの自由度のみに着目し定式化がなされてきた。しかし、実際には磁化は温度依存性があり、その振幅は温度により変化し得る。この磁化振幅の変化によって誘起される伝導電子ダイナミクスは未だ研究がなされていない。

上記の背景を踏まえ我々は、非自明な磁気構造をもつ金属中における磁化振幅のダイナミクスによって誘起される伝導現象の基礎理論を構築することを目的とした。具体的な理論モデルとしてスピン軌道相互作用がある電子系が、空間的に非一様構造を持つ局在磁化と交換相互作用で結合している系を考える。そこに、摂動として磁化振幅が周期的に振動している場合を考え、誘起される電流密度を線形応答理論を用い微視的に評価した。その結果、我々は、磁化振幅の振動によって実際に電流が誘起されることを明らかにし、その解析的表式の導出に成功した。

さらに、この現象がスピン軌道相互作用が強い系で観測されている spin-Galvanic 効果と、非一様磁気構造下でのトポロジカルホール効果の複合で発現している現象であることを明らかにした。スピン軌道相互作用は、波数空間におけるトポロジーと密接に関係していることが知られている。本研究の成果である磁気振幅振動誘起電流は、実空間（磁気構造）と波数空間（スピン軌道相互作用）のトポロジーの共存によって初めて発現する新しい伝導現象である。

●誌上発表 Publications

- Kurebayashi D. and Nomura K. : “Theory for spin torque in Weyl semimetal with magnetic texture”, Scientific reports 9 (1), 5365 (2019)\*.
- Kim S., Kurebayashi D. and Nomura K. : “Electrically-driven Domain Wall Motion in Quantum Anomalous Hall States”, Journal of the Physical Society of Japan 88 (8), 083704 (2019)\*.
- Kurebayashi D. and Nagaosa N. : “Theory of current-driven dynamics of spin textures on the surface of a topological insulator”, Physical Review B 100 (13), 134407 (2019)\*.

●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

(発表受理済) Kurebayashi D. and Nagaosa N. : Spin-transfer torque on a surface of topological insulator”, Focus Workshop on “The Future of Spintronics”, Iwate, Japan, Jan. (2020).

(発表受理済) Kurebayashi D. and Nagaosa N. : “Current-driven dynamics of spin textures on a surface of

topological insulators”, APS March Meeting 2020, Denver, USA, Mar. (2020).

(発表受理済) 紅林大地, 永長直人: “非一様磁化を持つ金属中の磁化振幅振動誘起電流の理論”, 日本物理学会 第75回年次大会, 名古屋大学, 3月 (2020).

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

• Kurebayashi D. and Nagaosa N. : “Current-driven dynamics of spin textures on surface of topological

insulator”, CEMS Symposium on Emergent Quantum Materials, Tokyo, Japan, May. (2019).

• Kurebayashi D. and Nomura K. : “Theory for spin torque in Weyl semimetal with magnetic textures”, International workshop spintronics 2019, Peru, Oct. (2019).

• Kurebayashi D. and Nagaosa N. : “Current-driven dynamics of spin textures on a surface of topological insulators”, Gordon Godfrey Workshop on Spin, Topology and Strong Electron Correlations, Sydney, Australia, Nov. (2019).

### XVIII-019

### Exploring On-Surface Photo-Synthesis under Ultrahigh Vacuum Conditions

Name: Chi ZHANG

Host Laboratory: Surface and Interface Science Laboratory  
RIKEN Cluster for Pioneering Research  
Laboratory Head: Yousoo KIM

In FY2019, I mainly studied (1) on-surface cycloaddition reaction; and (2) on-surface self-assembly of one tripod molecule by combination of scanning tunneling microscopy (STM) and density functional theory (DFT) calculations.

(1) Metal-mediated dehalogenative cycloaddition reaction.

Dehalogenative cycloaddition reaction is a powerful strategy to generate new ring scaffolds with  $\pi$ -conjugated features on a surface, and thus holds great promise toward atomically precise electronic devices or nanomaterials. The ortho-dihalo-substitution provides a good strategy to realize cycloaddition. However, the limited understanding of intermediate states involved hinders mechanistic exploration for further precise design and optimization of reaction products. In this study, we clarified a metal-mediated dehalogenative cycloaddition reaction pathway by visualizing the step-by-step evolution of stable local minima (competing surface-stabilized radicals and organometallic intermediates) toward cycloaddition products in real space. We chose the 2,3,6,7,10,11-hexabromotriphenylene (HBTP) molecule as the precursor with threefold ortho-dibromo-substitutes for possible dehalogenative

cycloaddition into two dimensions on Ag(111). By the combination of high-resolution STM imaging and DFT calculations, we further established the stepwise metal-mediated cycloaddition pathway on Ag(111), along with the competition between radicals and organometallic intermediates. Our results provide the experimental and theoretical understandings into the on-surface dehalogenative cycloaddition reaction and further halogen-based syntheses, which should be significant for the precise design and optimization of n-membered carbocyclic or heterocyclic architectures.

(2) Self-assembly of one three-dimensional tripod molecule.

Upright orientation of a molecular adsorbate is one of the most practical keys for controlling surface functionalities by using self-assembled monolayers. However, lateral interactions between the upright molecules become more complex than planar molecules since they are not confined in a single plane. In this work, we studied 1,8,13-tris(mercaptomethyl)-tritycenes (TMMT) molecule self-assembled on Ag(111). Through combined analysis of experimental and theoretical results of individual TMMTs, we verified their upright orientation on Ag(111). DFT calculations further show a weak

C-H $\cdots\pi$  intermolecular interaction between the triptycene units and a strong S-Ag molecule-substrate interaction. Our results provide a fundamental insight into the formation of upright-oriented molecular assemblies in which the stabilizing forces are not confined two-dimensionally. We reveal that the S atoms, methylene groups, and the triptycene unit of the TMMT molecules play different roles in the self-assembly process. Such fundamental understanding is of important consideration in the design of precursor molecules to achieve precisely-aligned functional surfaces and therefore to establish three-dimensional molecular architectures.

#### ●Publications

##### Original Papers

1. Zhang C., Kazuma E. and Kim Y.: Atomic-scale visualization of the stepwise metal-mediated dehaloge-

native cycloaddition reaction pathways: competition between radicals and organometallic intermediates. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2019, 58, 17736-17744.\*

2. Chaunchaiyakul S., Zhang C., Imada H., Kazuma E., Ishiwari F., Shoji Y., Fukushima T. and Kim Y.: Self-assembly growth of an upright molecular precursor with a rigid framework. *J. Phys. Chem. C*, 2019, 123, 31272-31278.\*

#### ●Oral Presentations

##### Conferences

Zhang C., Kazuma E. and Kim Y.: “Atomic-Scale Visualization of the Stepwise Metal-Mediated Dehalogenative Cycloaddition Reaction Pathways” 第13回 表面・界面スペクトロスコーピー, Tokyo Japan 2019, December 6-7.

## XVIII-020 ヘム輸送体によるヘム鉄の輸送と ATP 加水分解のシミュレーション

### Molecular Simulation of Heme Transport and ATP Hydrolysis by a Heme Transporter

研究者氏名: 田村 康一 Tamura, Koichi  
受入研究室: 計算科学研究センター  
粒子系生物物理研究チーム  
(所属長 杉田 有治)

鉄はすべての生物に必須の元素であり、DNAの複製や呼吸によるエネルギー生産に関与している。人体に感染した病原性細菌も増殖するために鉄を必要としており、様々な経路で鉄を含む化合物を宿主から奪う。ヘム（鉄-ポルフィリン錯体）は脊椎動物で最も多い鉄の供給源であり、細菌はヘム輸送体と呼ばれる膜蛋白質を使って効率よくヘムを取り込んでいる。本年度は、前年度にモデリングしたヘム輸送体の構造を基に、ストリング法とアンブレラ・サンプリングにより、「内向き状態」と「閉塞状態」の間の自由エネルギー解析を行った。シミュレーションではATPあり/なしの2条件を考慮した。ATP結合状態では、「閉塞状態」が「内向き状態」よりも安定であり、ATP結合により「内向き→閉塞」の方向の構造変化が生じることが示唆された。閉塞構造に対応するホモログの結晶構造としてビタミンB<sub>12</sub>輸送体BtuCD-Fが存在するが、この結晶化には

閉塞構造を安定化させるジスルフィド結合の導入が必須であった。我々の計算は、なぜジスルフィド結合が必要なのかを部分的に説明している：両状態の自由エネルギー差は1.5 kcal/molとそれほど顕著な差はないので、「閉塞→内向き」の方向の反応を抑える必要があるのだろう。一方、ATPが存在しない条件では、「閉塞状態」が不安定化し、「内向き状態」が相対的に安定化した。これは、ATPが存在しない条件下でのヘム輸送体の結晶構造が「内向き状態」であったことを定量的に説明している。以上の結果をまとめた論文を現在執筆中である。

また、排出型ヘム輸送体に関して、ヘムの結合過程を調べるために、gREST法を適用した。gREST法では、特定の分子のエネルギー関数の一部をスケールリングすることでサンプリング効率を上げる。エネルギー関数の選び方に様々な組み合わせが考えられるが、静電相互作用を含めると系が不安定化する

ことが判明した。一方で、二面角とLJ相互作用を選択すると安定に計算できるが、サンプリング効率の大幅な効率化には至らなかった。来年度は効率を最大にする他の組み合わせを模索する。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Tamura K., Sugimoto H., Shiro Y., Sugita Y.: “Chemo-mechanical Coupling in the Transport Cycle of a Heme ABC Transporter”, *The Journal of Physical Chemistry B*, 123, 7270-7281 (2019).\*

#### ●口頭発表 Oral presentations

(学会)

Tamura K.: “ヘム輸送体によるヘム鉄取り込みの全容解明”, 第6回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会, 品川, 11月(2019).

Tamura K.: “Atomistically Deciphering Alternating Access Mechanism of the Mitochondrial ADP/ATP

Carrier with Molecular Simulations”, the 2nd Tokyo ATPase Workshop, 東京, 9月(2019).

Tamura K.: “Atomistically Deciphering Alternating Access Mechanism of the Mitochondrial ADP/ATP Carrier with Molecular Simulations”, 第19回日本蛋白質科学会年会, 神戸, 6月(2019).

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

Tamura K., Sugita Y.: “Free Energy Analysis for the Conformational Changes of a Heme ABC Transporter BhuUV-T”, the 5th International Conference on Molecular Simulation (ICMS2019), Jeju, 11月(2019).

Tamura K., Sugita Y.: “Free Energy Analysis for the Conformational Changes of a Heme ABC Importer BhuUV-T”, 第57回日本生物物理学会年会, 宮崎, 9月(2019).

### XVIII-021

#### チオフェン縮環ジラジカル化合物： 可逆的重合挙動の解明と一重項分裂材料への展開

#### Thiophene-Fused Diradicals: In-Depth Investigation of their Unprecedented Reversible-Polymerization and Application to Singlet Fission

研究者氏名: 鈴木直弥 Suzuki Naoya  
受入研究室: 創発物性科学研究センター  
創発分子機能研究チーム  
(所属長 瀧宮 和男)

可逆的な共有結合の形成を示す化合物は、外部刺激応答性材料の基本骨格となりうる。このような化合物として、当研究室では溶液状態ではモノマーとして存在し、固体状態では分子同士が重合するチオフェン縮環有機ジラジカル化合物 (Thiophene-fused diradicaloids: TFD) を報告した。この重合挙動は可逆的であり、温度変化および溶媒種の置換によっても誘起することができる。加えて、呈色の変化を伴うことから、刺激応答性色素への展開が期待される。しかし、これまで可逆的重合挙動と分子構造の間の相関について十分な知見が得られておらず、分子構造のスイッチングをコントロールする分子設計指針の確立が必要とされていた。

今年度は、TFDの可逆的重合挙動に関して、置

換基の立体効果を精査した。これまでに、末端部位に*t*-ブチル基をもつ誘導体が、安定なポリマー構造をもつことがわかっていた。この置換基効果についてさらなる知見を得るため、種々の分岐アルキル基を導入した誘導体を合成し、重合挙動を比較した。その結果、第一級、第二級、第三級の順に、末端アルキル基がかさ高くなるにしたがって、重合挙動が誘起されることを明らかにした。続いて、置換基がどのようにポリマー構造を安定化しているかを明らかにするため、まず重合体の構造推定を試みた。その結果、末端に*i*-プロピル基をもつ誘導体の単結晶中において、TFDが環状四量体構造をもつことが明らかになった。また、溶媒中での重合体の構造解析を行うために、NMR測定を用いた拡散係数の評

備 (Diffusion ordered spectroscopy: DOSY 法) に着目した。末端にエチル基、*i*-プロピル基、*t*-ブチル基をもつ誘導体について、DOSY 法から重合体の分子量を推定したところ、溶媒中においても四量体が形成されることが示唆された。以上の結果から、TFD の重合では四量体構造が選択的に形成されると仮定し、それぞれの誘導体について、温度可変吸収スペクトル測定から重合過程の熱力学的パラメータ変化を解析した。その結果、かさ高いアルキル基をもつ誘導体では重合に伴うエンタルピー項の安定化が大きく、重合が促進されていることを明らかにした。通常、かさ高い置換基は立体障害により分子

間の近接を阻害するため、重合した状態を不安定化すると考えられる。そのため、本研究で観測された置換基効果は特異的である。以上の結果は、置換基の立体構造によって可逆的重合挙動が制御可能なことを示唆するものであり、感温性有機材料の分子設計における重要な知見となった。

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

鈴木直弥: “チオフェン縮環ナフタレン骨格をもつジラジカル化合物の動的共有結合挙動に与える置換基効果”, 第13回有機 $\pi$ 電子系シンポジウム, 宮崎, 11月 (2019)

## XVIII-022 Development of Quantum Spectroscopy beyond the Classical Limit

Name: Korenobu MATSUZAKI

Host Laboratory: Molecular Spectroscopy Laboratory

RIKEN Cluster for Pioneering Research

Laboratory Head: Tahei TAHARA

Absorption spectroscopy is undoubtedly one of the most widely used spectroscopic techniques. It enables us to identify and quantify the chemical species contained within a sample. An absorption spectrum is obtained by measuring the number of photons transmitted through the sample and normalizing it against the number of incident photons. Since the number of incident photons cannot be measured directly, a separate reference measurement is necessary to estimate it. This procedure, however, introduces an error, because the number of photons in the reference measurement cannot be made exactly the same as the number of incident photons in the sample measurement due to the statistical uncertainty of the number of photons emitted from a classical light source. The error due to this mechanism, the so-called “shot noise”, is usually considered to be unavoidable, because it arises from the intrinsic property of classical light such as laser.

Contrary to this common belief, there is actually a chance to break this limit when “nonclassical” light is used as the light source. Nonclassical light, or quantum light, is a state of light that cannot be described within the framework of classical electrodynamics. Entangled photon pairs, where two photons exist as a pair, are a

typical example. Last year, using entangled photon pairs as the light source, I developed a novel absorption spectrometer and demonstrated that it is indeed possible to measure absorption spectra with the noise level suppressed below the shot-noise limit. This year, with further optimizations of the experimental setup, a noise suppression as large as 30% below the shot-noise limit was achieved.

In order to highlight the strength of sub-shot-noise absorption spectroscopy developed in this study, three dilute binary mixture solutions containing two kinds of dye molecules (Rhodamine 6G and Thiazole Orange) were prepared and used as samples. Absorption spectra of each solution were measured by sub-shot-noise absorption spectroscopy, and the concentration of each dye molecule was estimated from the obtained sub-shot-noise absorption spectra. As a comparison, the same procedure was repeated also using conventional absorption spectra. With the conventional absorption spectra, the three sample solutions could not be clearly distinguished by the estimated concentrations, because the concentration was not estimated precisely enough due to the noise in the absorption spectra. That is to say, the precision of the concentration estimation was lim-

ited by the shot noise, which is intrinsic to all the conventional measurements. With sub-shot-noise absorption spectra, on the other hand, the concentration of each species could be estimated with higher precision because the noise level in the absorption spectra was suppressed below the shot-noise limit. As a consequence, the concentration difference among three solutions was clearly observed. This result shows that the concentration resolution achieved by sub-shot-noise absorption spectroscopy has surpassed that of conventional absorption spectroscopy, which is fundamentally limited by the shot noise. In this sense, it is possible to say that a “superresolution” measurement of the concentrations was realized by sub-shot-noise absorption spectroscopy developed in this study.

#### ●Publications

##### Papers

- [1] Matsuzaki K., Nihonyanagi S., Yamaguchi S., Nagata T. and Tahara T.: Quadrupolar mechanism for vibrational sum frequency generation at air/liquid

interfaces: Theory and experiment. *J. Chem. Phys.* 151 (6), 064701 (2019).

- [2] Hail C. U., Höller C., Matsuzaki K., Rohner P., Renger J., Sandoghdar V., Poulidakos D. and Eghlidi H.: Nanoprinting organic molecules at the quantum level. *Nat. Commun.* 10, 1880 (2019).

#### ●Oral Presentation

##### Conference

Matsuzaki K., Yamaguchi S. and Tahara T.: “和周波発生分光法における非共鳴信号の複素位相の見積もり”, 第13回分子科学討論会, Nagoya, September (2019).

#### ●Poster Presentation

##### Conference

Matsuzaki K. and Tahara T.: “量子もつれ光を用いた新規吸収分光法の開発”, 「物質階層原理研究」 & 「ヘテロ界面研究」合同春合宿, Gotemba, May (2019).

## XVIII-023

### 青色光受容体蛋白質におけるDNA修復機構の解明 Theoretical Analysis on the DNA Repair Mechanism of Blue-Light Photoreceptors

研究者氏名: 佐藤 竜馬 Ryuma Sato  
受入研究室: 生命機能科学研究センター  
計算分子設計研究チーム  
(所属長 泰地 真弘人)

生物は常に紫外線に晒されている。そして、生物が保有しているDNAは紫外線の照射により損傷することもよく知られている事実である。哺乳類においては、この紫外線によるDNA損傷が修復されずにいると皮膚がんを誘発することが明らかになっている。そこで生物はこの紫外線損傷DNAを修復する機能を進化の過程で獲得してきた。なかでもバクテリアから有袋哺乳類までが保有している光回復酵素(PLs)の存在が知られている。PLsは補酵素としてフラビンアデニンジヌクレオチド(FAD)を有しているフラボタンパク質であり、このFADが青色の光を吸収することでDNAの損傷部位への光誘起電子移動反応が起こり損傷部位が修復される。ま

た、PLsは紫外線損傷したDNAを認識し結合する機能を有している。しかし、この紫外線損傷DNAの認識・結合機構は完全には明らかとされていないが、PLsがDNAを認識し結合するときに損傷部位が二重らせん構造から外れるフリッピングが起こっていることが明らかになっている。本研究は実験では逐次観測することが困難である紫外線損傷DNAの認識・結合過程を計算科学的手法を用いることで明らかにすることができると期待される。

本年度はPLsが紫外線損傷DNAをどのように認識し結合しているのかを明らかにするため分子シミュレーションを用いてその反応機構を解析した。本研究ではPLsと紫外線損傷DNAの複合体のX線結

晶構造を初期構造とした分子動力学 (MD) 計算を実行し、続いてMD計算から得られた緩和構造に対してPulling法 (二分子間に外部ポテンシャルを加えることで互いの距離を離していく手法)を実行し、ある程度PLsとDNAを引き離した構造を取得した。このようにして引き離された状態を初期構造としてメタダイナミクス法 (設定した反応座標に従って外部ポテンシャルを加えていき様々な状態遷移を観測する手法)を実行した。また同様にDNA単体にも実行し周囲のタンパク質の有無によってフリッピングの起こりやすさを比較・検討した。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Hosokawa Y., Sato R., Iwai S. and Yamamoto J.: “Implication of a Water Molecule for Photoactivation of Plant (6-4) Photolyase”, *The Journal of Physical Chemistry B*, 123 5059-5068 (2019)\*

Hirata G., Kobayashi Y., Sato R., Shigeta Y., Yasuda N. and Maeda H.: “Pyrrole-Based  $\pi$ -System-PtII Complexes: Chiroptical Properties and Excited-State Dynamics with Microsecond Triplet Lifetimes”, *Chemistry - A European Journal*, 25 8797-8804 (2019)\*

Imai Y., Yamamoto T., Sekimoto A., Okano Y., Sato R. and Shigeta Y.: “Numerical investigation of the nano-scale solute Marangoni convections”, *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 98 20-

26 (2019)\*

Kimatsuka M., Sato R., Harada R., Shoji M. and Shigeta Y.: “Effects of Antifreeze Protein from Rhagium Inquisitor Binding on Ice Growth: A Molecular Dynamics Study”, *Chemistry Letters*, 48 223-226 (2019)\*

(単行本)

Kitoh-Nishioka H., Sato R., Shigeta Y. and Ando K.: “Chapter 22: Liner Combination of Molecular Orbitals of Fragment (FMO-LCMO) Method: Its Application to Charge Transfer Studies”, in *Recent advances of the fragment molecular orbital method. Subtitle: Enhanced performance and applicability*, Ed. Y. Mochizuki, S. Tanaka, and K. Fukuzawa, Springer. in print

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

Sato R., Mori Y., Okimoto N. and Taiji M.: “Computational insights into DNA binding affinity and its repair activity for photolyase/cryptochrome superfamily”, 日本生物物理学会第57回年会, 宮崎, 9月 (2019)

Sato R., Mori Y. and Taiji M.: “Theoretical Study on DNA Binding Mechanism for Blue-Light photoreceptors”, Joint 12<sup>th</sup> EBSA 10<sup>th</sup> ICBP-IUPAP Biophysical Congress., Spain, 7月 (2019)

## XVIII-024

### 有機光電変換過程の分子論的探求

#### Molecular Level Investigations of Organic Photoelectric Conversion

研究者氏名: 中野 恭兵 Nakano Kyohei  
受入研究室: 創発物性科学研究センター  
創発機能高分子研究チーム  
(所属長 但馬 敬介)

有機材料の分子構造の小さな変化が有機光電変換の効率を著しく変えることがしばしば見られるが、その理由は明確ではない。この点を明らかにする鍵は電子ドナーと電子アクセプターという二種類の有機材料の接触界面に隠れていると考えられる。なぜなら、有機光電変換はドナーとアクセプター間の電荷のやり取りが本質的な原理だからである。本研究

の目的は、微視的な視点では二分子間の電荷のやり取りで特徴付けられる光電変換過程とその結果発現する巨視的な測定系における電気特性との関連を明らかにすることである。界面での現象を捉えるため、ドナーとアクセプターの二種の有機材料の薄膜を平面で積層したシンプルなヘテロ接合界面を研究対象とする。



本年は以下の進展があった。

昨年度得られた実験結果と解釈をブラッシュアップし、Nature Communications誌に受理・掲載された。

電氣的過渡測定による有機薄膜太陽電池の評価の基礎部分を論文にまとめ、AIP Advancesに投稿・掲載された。

大気下光電子収量法を用いて材料の状態密度を精密に評価することを始め、数々の材料を検討しつつある。材料の状態密度の評価と、太陽電池内部の静電ポテンシャルシミュレーションにより、光電変換の過程をより詳細に解析できるようになると期待される。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

1. Kyohei Nakano, Yujiao Chen & Keisuke Tajima, “Quantifying charge carrier density in organic solar cells by differential charging techniques.”, AIP Advances, 9, 125205 (2019)\*
2. Kyohei Nakano, Yujiao Chen, Bo Xiao, Weining Han, Jianming Huang, Hiroyuki Yoshida, Erjun Zhou & Keisuke Tajima, “Anatomy of the energetic driving force for charge generation in organic solar cells”, Nature Communications, 10, 2520 (2019)\*
3. Fanji Wang, Kyohei Nakano, Hiroshi Segawa, and Keisuke Tajima, “Phytol-Derived Alkyl Side Chains for  $\pi$ -Conjugated Semiconducting Polymers”, Chem. Mater., 31, 6, 2097-2105 (2019)\*

#### ●口頭発表 Oral Presentations

1. Kyohei Nakano, Weining Han, Jianming Huang, Yujiao Chen, Hiroyuki Yoshida and Keisuke Tajima “Minimum Energetic Driving Force for Charge Generation in Organic Solar Cells” 2019 MRS Fall meeting & exhibit, EN12. 05. 09, December 1-6 Boston Massachusetts, USA., 2019
2. 中野 恭兵, Chen Yujiao, Han Weining, Huang Jianming, 吉田 弘幸, 但馬 敬介, “有機薄膜太陽電池におけるエネルギー損失” [21a-E101-7], 第80回応用物理学会秋季学術講演会, 2019/09/17-21, 北海道大学 札幌キャンパス, 2019
3. 中野 恭兵, Chen Yujiao, Han Weining, Huang Jianming, 吉田 弘幸, 但馬 敬介, “有機薄膜太陽電池の電子状態間のエネルギー差と電荷生成効率の相関” [11p-S221-8], 第66回応用物理学会春季学術講演会, 2019/03/09-12, 東京工業大学 大岡山キャンパス, 2019

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

1. Kyohei Nakano and Keisuke Tajima, “Minimum energetic driving force for charge generation in organic solar cells”, CEMSupra 2019, P-45, December 9-10, 2019, Ito-hall, University of Tokyo, Japan, 2019
2. Kyohei Nakano, Yujiao Chen, Weining Han, Jianming Huang, Hiroyuki Yoshida, Keisuke Tajima, “Correlation between the energetic difference of the electronic states and charge generation efficiency in organic solar cells” 10th International Conference on Molecular Electronics and Bio Electronics, 2019, 06/25~27, Nara, Japan, 2019

## XVIII-025 Visualization of Dynamic Compaction of Nucleosome Using Photoactivable-FRET

Name: Sooyeon KIM

Host Laboratory: Laboratory for Cell Systems Control

RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research

Laboratory Head: Yuichi TANIGUCHI

In the present study, we aim to develop novel bioanalysis based on a single-molecule fluorescence microscopy and investigate heterogeneity among individual single cells and samples with low expression number. Single molecule fluorescence imaging is a

cutting-edged technique that reveals molecular-level spatial information of individual molecules in biological samples at the limit of resolution. If this technique is successfully applied to various bioanalysis, such as electrophoresis, chromatography, immunostaining,

etc., we can achieve great improvement of the detection limit up to a real 'single-molecule'.

Last year, we have established an experimental and analytical procedure of single-molecule fluorescence gel and capillary electrophoresis using our home-built light-sheet microscope, PISA microscope. In FY 2019, we have carried out (1) a preparation of fluorescently labeled single cell lysate and (2) analysis of biomolecules through its light scattering. Using a single-cell picking/handling instrument, a droplet containing a single cell could be easily prepared, and was further processed to label fluorescence dye and run gel electrophoresis. So far, we have succeeded to distinguish tens of protein bands from three to five cells by single-molecule fluorescence gel electrophoresis. In order to apply this technique to a single cell, optimization of fluorescence dye concentration and extraction of target biomolecules are still required. Besides, ultrasensitive 2D gel electrophoresis and single-cell western blot have been successfully realized by combining a PISA microscope and corresponding commercial machines.

Furthermore, the potential of light scattering for bioanalysis has been evaluated. According to Young et al. (Science, 2018, 360, 423), intensity of scattered light is proportional to the size of the particle. In the case of protein, its molecular weight is mostly proportional to

the size of the protein, indicating the intensity of scattered light can be used to measure molecular mass of a certain protein. Currently, we are trying to develop the optimized microscopic system to study not only fluorescence, but also light scattering phenomenon by interaction between light and biomolecules.

## ●Oral Presentations

### Conferences

1. Kim S.: "Single Particle Photoluminescence Microscopy Provides Valuable Insights of Photogenerated Charge Carriers." International Conference on Photocatalysis and Photoenergy 2019, Incheon Korea 2019, 22-25 March.
2. Kim S., Taniguchi Y.: "Single Molecule Fluorescence Gel Electrophoresis for Single Cell Proteome Analysis." 第41回日本光医学・光生物学会, ホテルグランテラス富山 2019, 19-20 July.
3. Kim S.: "Molecular-Resolved Proteomics realized by 3D Single-Molecule Imaging." RIKEN BDR Retreat, 淡路島夢舞台 2019, 8-9 Oct.
4. Kim S., Taniguchi Y., Kamarulzaman L.: "Ultrasensitive Protein Analysis via Single-Molecule Fluorescence Gel Electrophoresis" 日本化学会第100春季年会, 東京理科大学 野田キャンパス 2020, 22-25 March.

## XVIII-026 ラマン分光法を用いたNa<sup>+</sup>およびK<sup>+</sup>特異的なインジケータの開発

### Development of Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup> Specific Indicators with Raman Spectroscopy

研究者氏名: 江越 脩祐 Egoshi, Syusuke

受入研究室: 開拓研究本部

袖岡有機合成化学研究室

(所属長 袖岡 幹子)

生命現象の作用機序解明には、瞬間的および長期的なイオン濃度の変化を正確に計測することが非常に重要である。しかし、Na<sup>+</sup>とK<sup>+</sup>においては既存するインジケータのイオン選択性が非常に悪く、微弱な濃度変化の正確測定は行われていない。従来、イオン親和性の性能評価は赤外分光法や吸光度法などで測定されてきたが、赤外分光法では水中での測定が行えず、吸光度法では得られるシグナルのハンチ幅が広いいためイオン親和性の比較を正確に行う事

ができない。そのため現在は、水中でも測定でき定量性のある蛍光分析法が主流になっているが、蛍光基を導入した化合物の合成には多大な時間と労力を費やさねばならない。そこで、ラマン分光法に着目した。ラマン分光法は得られるラマンシグナルが非常にシャープかつ水中での定量が可能である。さらに、化合物の全ての分子振動を一度に解析することができるため、蛍光基のような複雑な合成法を必要とせず、また、検定溶液中でインジケータ由来の

ラマンシグナルのシフトを解析することで、イオン親和性の性能評価を簡便に行う事ができると期待される。

前年度は、ラマン分光法を用いた水中で2種の化合物濃度を定量的に解析できる手法（測定条件や濃度の設定、スペクトル解析法等）を構築し、低濃度 (< 100  $\mu$  M) 条件下でも照射するレーザーを高強度・長時間照射することで解析可能なことを確認した。また、水溶液中でアルキン (C $\equiv$ C) ラマンシグナルの経時的なシフトを定量的に評価できることを確認した。

今年度は、細胞内でも化合物構造や周辺元素の変化によりそのラマンシグナルのシフトを検出できる新規ラマンタグの開発および化合物の合成を行った。

(1) 去年度の知見を基に細胞内でも化合物のラマンシグナルのシフトを解析できる手法の確立を行った。しかし、生細胞に対し照射するレーザーを高強度・長時間使用すると細胞が死んでしまうため、低濃度インキュベーションの条件で行うことは不可能であると結論付けた。

(2) アルキン (C $\equiv$ C) だけではなく、炭素-重水素結合 (C-D) のラマンシグナルも化合物の構造や周辺元素が変化することで、検出されるラマンシグナルがシフトすることを見出した。

次年度は、これまでの知見を基にインジケータの開発を行う。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Toshitaka Okamura, Syusuke Egoshi, Kosuke Dodo, Mikiko Sodeoka, Yoshiharu Iwabuchi & Naoki Kanoh: "Highly Chemoselective gem - Difluoropropargylation of Aliphatic Alcohols", *Chem. Eur. J.* 2019, 25, 16002-16006.

#### ●口頭発表 Oral Presentations

江越脩祐, どの孝介, 大金賢司, 袖岡幹子: "重水素化アルキンを用いたDual Raman Imaging研究", 日本薬学会第140年会, 国立京都国際会館(京都市), 3月26日(2020年)

## XVIII-027 Cancer Targeted Delivery of Peptide-Assembled Carriers Equipped with Dual Aptamer Ligands

Name: Nandakumar AVANASHIAPPAN

Host Laboratory: Emergent Bioengineering Materials Research Team  
RIKEN Center for Emergent Matter Science  
Laboratory Head: Ito YOSHIHIRO

Aptamer-ligand conjugates for cancer targeting: Folate receptor- $\alpha$  (FR $\alpha$ ) was identified as cancer cell targeting receptor which is overexpressed in many types of cancer. Peptide aptamer which enhances the binding affinity of folic acid (FA) with FR $\alpha$ , was selected using *in silico* methods. The negative selection was carried out with folate receptor- $\beta$  (FR $\beta$ ) which is expressed in normal cell albeit in low level. Two different types of peptide aptamer and ligand (FA) conjugations were explored for *in silico* analysis. The first design involved, folic acid was conjugated with unnatural amino acid (4-azido-L-phenylalanine) of peptide aptamer through click reaction of DBCO-amine as a spacer molecule. Folic acid was directly conjugated

with unnatural amino acid (4-amino phenylalanine) of peptide aptamer as a second design of aptamer-ligand conjugate. Peptide sequences which enhances the binding affinity of FA with FR $\alpha$  and decreases the binding affinity with FR $\beta$ , were recognized based on binding score values. Then, the selected sequences of aptamer-ligand conjugates were chemically synthesized and analyzed using binding affinity studies. Two aptamer-ligand candidates from each ligand design were identified as a potential targeting system for FR $\alpha$ . Presently, the modification of aptamer-ligand conjugates with nanoplatfrom is underway for *in vitro* and *in vivo* analysis.

Peptide based nano-assembly as a drug carrier: Am-

phiphilic polypeptide, Sar<sub>30</sub>-(Aib-Leu)<sub>6</sub> (S30L12) was synthesized and studied the assembly behavior of polypeptide under aqueous condition in presence of small ratio of organic co-solvent such as ethanol (EtOH) and acetonitrile (CH<sub>3</sub>CN). Interestingly, nature and composition of co-solvent critically affected the self-assembly behavior of S30L12. The co-solvent EtOH showed the formation of nanotube morphology from S30L12 under aqueous condition at rt, whereas CH<sub>3</sub>CN trapped the meta-stable intermediates, namely twisted and helical ribbon morphologies. Particularly, EtOH strengthened hydrogen bonding network of water molecules, which influences assembly behavior of S30L12. ACN accumulated at hydrophobic core of nano-assembly, and thus inducing kinetic behavior of nano-assemblies. These behaviors of co-solvents were resemblance with the behavior of native protectant and denaturant osmolytes on peptide's stability. As results, unnatural organic small molecules (EtOH and CH<sub>3</sub>CN) were identified with the behavior of osmolytes on peptide assembly. To make cancer environmental responsive drug delivery system, hybrid nano-assembly of polypeptide S30L12 and synthetic lipid was proposed. Presently, chemical conjugation of S30L12 and synthetic lipid

with redox linker is underway to prepare the multi-stimulus responsive peptide carriers.

#### ●Publications

Darmatti D., Miyatake, H., Nandakumar, A., Ueda, M., Kobayashi, K., Kiga, D., Yamamura, M., and Ito, Y.: Enhancement of Binding Affinity of Folate to its Receptor by Peptide Conjugation. *Int. J. Mol. Sci.* published\*

#### ●Poster Presentations

1. Nandakumar A., Ueda M., and Ito, Y.: "Co-Solvent Induced Formation Pathway Selection for Peptide Nanotube" 9<sup>th</sup> CEMS Research camp, Kumagaya, Japan 2019, August 2-3.
2. Nandakumar A., Ueda M., and Ito, Y.: "Solvation-Directed Formation Pathways for Peptide Nanotubes" 56<sup>th</sup> Japanese Peptide Symposium, TMDU, Tokyo, Japan 2019, October 23-25.
3. Nandakumar A., Ueda M., and Ito, Y.: "Controlled Packing of Amphiphilic  $\alpha$ -Helical Polypeptide by Kosmotropic Solvent" CEMSupra 2019, UT, Tokyo, Japan 2019, December 9-10.

## XVIII-028 Investigating the Role of an RNA Methyltransferase: Fibrillarin in Neural Stem Cells

Name: Quan WU

Host Laboratory: Laboratory for Cell Asymmetry

RIKEN center for Biosystems Dynamics Research

Laboratory Head: Fumio MATSUZAKI

The purpose of this study is to understand the function of Fibrillarin (Fbl), a methyltransferase of Nm modification on RNA, during neurogenesis. I have proved that neural stem cell (NSC)-specifically knock-out of Fbl caused microcephaly with disrupted neuron layers. Moreover, I collected single cells from control and mutant mice at several time points and performed RNA-seq analysis. Bioinformatics analysis suggests that NSCs in mutant mice failed to change their fate properly. These results indicate that Fbl is an important regulator of NSC fate.

In this year, I further investigated the targets of Fbl during neurogenesis. Using ribosome profiling, I found that Fbl selectively facilitates translation of its target mRNAs whose 5'UTRs are characterized by a ploy (U) motif or the highly organized secondary structure. Among these genes, I identified Ezh2 and Kdm6b, which encodes a methyltransferase and a demethylase of H3K27me<sub>3</sub>, respectively, as important targets of Fbl. Inhibition of H3K27me<sub>3</sub> delays temporal patterning transition and impedes neurogenesis. The phenotype of inhibition of H3K27me<sub>3</sub> was similar with that

observed in Fbl mutant mice. Next, I proved that Fbl promotes translation of Ezh2 and Kdm6b through internal ribosome entry sites (IRES) elements on their 5'UTR. Knocking out 5'UTR of Ezh2 and Kdm6b affected protein level but not mRNA level of these genes, indicating that these elements are required for translation of these genes through Fbl. Nm sites are detected in both mRNA and rRNA. However, Nm on mRNA have been proved to disrupt tRNA decoding and suppress translation. According to these results, downregulation of translational efficiency after the deletion of Fbl may ascribed to the Nm sites on rRNA. Indeed, I

detected several sites on rRNA that reduced their methylation level after the deletion of Fbl. Therefore, I provided a model in which Fbl-dependent Nm modification on rRNA may facilitate ribosome to recognize IRES elements on 5'UTR and promote translation.

#### ●Oral Presentations

Symposium

Quan Wu, Yuichi Shichino, Shintaro Iwasaki and Fumio Matsuzaki: German-Japanese Developmental Neuroscience Meeting, Kyoto, Japan, 11<sup>th</sup> -13<sup>th</sup> January, 2020.

XVIII-029

### 幻覚の神経メカニズムの探索

#### The cortical mechanism of hallucinatory perception

研究者氏名: 大石 康博 Yasuhiro Oisi  
受入研究室: 脳神経科学研究センター  
触知覚生理研究チーム  
(所属長 村山 正宜)

幻覚とは外界からの入力がない感覚を体験する症状である。幻覚の原因は精神疾患、精神薬、嗜好品の過剰摂取まで様々であり、私たちの大半は人生で幻覚を経験する。長らく幻覚の神経メカニズム分かっていなかったが、近年の脳機能イメージングの研究から、脳が外部入力（ボトムアップ入力）の減衰を、内部入力（トップダウン入力）により補うことで、幻覚が生じるとされている。しかし、これまでトップダウン入力と幻覚の対応関係が定量的に評価されたことはない。また、トップダウン入力がどのような神経回路を介して幻覚を生じるか明らかにされていない。そこで、マウスの幻覚モデルを確立し、トップダウン入力の強度と幻覚頻度の相関を測定する。その上で、2光子イメージングにより、幻覚を生じているマウスの神経活動と形態情報を合わせて解析することで、幻覚の神経回路モデルを構築する。トップダウン入力はどのように幻覚を生じるのか、

またどのような神経メカニズムにより幻覚がおこるのか、についての解明を目指す。

前年度は、マウスの幻覚モデルを確立し、トップダウン入力の人為的な活性化が幻覚を引き起こすことを明らかにした。そこで今年度は、さらにトップダウン入力の人為的な活性化と共に、その入力部位を特異的に抑制し幻覚が起きなくなることを明らかにした。具体的には、光遺伝学的な手法により、トップダウン入力を人為的に活性化すると幻覚が生じた。さらに高次脳領域から体性感覚野へと至るトップダウン入力をシナプスに抑制するCNQXにより抑制すると、幻覚が減衰した。

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

大石 康博 Somatosensory cortex mediates top-down control of perception and hallucination 理研大交流会 理化学研究所 12月5日

**XVIII-030 コヒーレントX線回折イメージングによる細胞丸ごとの四次元構造解析**  
**Coherent X-ray Diffraction Imaging of Three-dimensional Structures**  
**of Whole Biological Cells in Specific Phases on Cell Cycles**

研究者氏名: 小林周 Amane Kobayashi  
受入研究室: 放射光科学研究センター  
生命系放射光利用システム開発チーム  
(所属長 山本 雅貴)

コヒーレントX線回折イメージング (Coherent X-ray diffraction imaging: CXDI) は  $\mu\text{m}$  サイズの非結晶試料を数十 nm 分解能で可視化する構造解析手法である。CXDI 実験では、高空間コヒーレント X 線を試料に入射し、Fraunhofer 回折強度パターンを二次元検出器で記録する。回折強度パターンに位相回復アルゴリズムを適用することで X 線入射方向に投影した二次元電子密度像が得られる。回折強度パターンを信号対雑音比高く記録するためには入射 X 線の強度を大きくする必要があるので、第三世代放射光施設 SPring-8 及び X 線自由電子レーザー施設 SACLA で得られる X 線光源を利用している。本研究で対象とする試料は細胞あるいは細胞小器官であり、CXDI を用いてこれまで電子顕微鏡と光学顕微鏡による可視化が困難であった空間階層領域の解明することを目的としている。

SPring-8 では試料を回折装置のゴニオメーターを用いて回転させ、配向ごとの回折強度パターンを記録し、後に三次元電子密度分布を回復する CXDI トモグラフィー実験を実施している。実験では、細胞試料を悪膜の上に吸着させ、液体エタンによって急速凍結したものを回折計内部の液体窒素液溜めポットに固定し、X 線を入射する。本年度は薄膜に細胞の受け皿となる貫通穴を設けることで、試料の変形を防ぐことができるようになり、試料本来の形状の電子密度像が得られるようになった。また、薄膜に導電性を持たせることによって、X 線照射による電荷の蓄積を低減することに一定の成果を挙げている。技術的なアップデートとして今後は試料への金

属修飾等によって短い露光時間で高い信号対雑音比の良い回折強度パターンを記録し、測定時間を短縮することを目指す。

SACLA における CXDI 実験では 1 時間あたりに 1 万点以上の頻度で回折強度パターンが収集できるため、これを計算機を用いて自動で効率よく位相回復するシステムが必要であった。そこで、回折強度をフーリエ変換して得られる自己相関関数を拘束条件とした新規位相回復アルゴリズムを開発した。本手法を用いることで、経験的に決定していたパラメーターを自動で決定することが可能となり、これまでの  $\sim 1/10$  の時間で電子密度分布を回復することができるようになった。さらに同様のスキームを用いて位相回復が困難なデータを除外することが可能となり、これまで目視で選別してきた作業が不要となった。解析時間が短縮されることになるので、SPring-8 での実験と合わせてこれまでにない構造解析手法の開発を加速度的に進めることができると期待している。

●ポスター発表 Poster Presentations  
(学会)

小林周, 高山裕貴, 山本隆寛, 大出真央, 岡島公司, 笠口友隆, 山本雅貴, 中迫雅由: “コヒーレント X 線回折イメージング実験で得られる回折強度パターンの位相回復計算の高効率化”, 第 33 回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウム, 名古屋, 1 月 (2020)

XVIII-031

ディープラーニングを用いた形態形成における  
遺伝子制御ネットワークの推測方法の確立

Development of a deep learning-based method to predict gene  
regulatory networks in morphogenesis

研究者氏名: 鬼丸 洸 Onimaru Koh  
受入研究室: 生命機能科学研究センター  
バイオインフォマティクス研究開発チーム  
(所属長 二階堂 愛)

マウスの四肢をモデルシステムとして、ディープラーニングを用いた形態形成における遺伝子制御ネットワークの推測方法の確立を目的とした。DNAシーケンシングの技術の向上にともない、様々な種やヒト個人のゲノム配列情報が得られるようになってきた。一方で、ゲノム配列から、形態などの生体の特徴を抽出する手法は未発達である。本研究では、四肢形成をケーススタディとして、生物の形態の情報がゲノム配列にどのようにコードされているのかを、ディープラーニングを応用した転写制御配列のパターン解析手法および遺伝子制御ネットワーク推測方法を開発することを通して理解する。

本年度は、ディープニューラルネットワークを応用した転写制御配列のパターン認識を行うプログラムに関する研究発表や論文執筆および、四肢形成過程におけるトランスクリプトームおよび転写制御配列の時系列データ解析に関する論文執筆を行い現在投稿中である。

●誌上発表 Publications

(総説)

Koh Onimaru, Luciano Marcon “Systems biology approach to the origin of the tetrapod limb”, arXiv pre-

print arXiv:1907.02730 (2019)

●口頭発表 Oral Presentations

Koh Onimaru, Kaori Tatsumi, Chiharu Tanegashima, Mitsutaka Kadota, Osamu Nishimura, Shigehiro Kuraku “Systematic comparison of gene regulation in fin and limb development” The 52nd annual meeting of the Japanese Society of Developmental Biologists, Osaka, 14-17 May, 2019.

●ポスター発表 Poster Presentations

Koh Onimaru, Kaori Tatsumi, Chiharu Tanegashima, Osamu Nishimura, Mitsutaka Kadota, Shigehiro Kuraku: “Omics approaches to the fin-to-limb evolution”, EMBO Workshop: Limb Development and Regeneration: New Tools for a Classic Model System, Barcelona, July (2019)

Koh Onimaru, Osamu Nishimura, Shigehiro Kuraku, “Predicting gene regulatory regions with a convolutional neural network for processing double-strand genome sequence information” 日本バイオインフォマティクス学会2019年年会 第8回生命医薬情報学連合大会 IIBMP2019, 東京 9月 (2019)

XVIII-032

テラヘルツ光を応用した生体高分子制御技術の探索

Regulation of Biopolymer Morphology using THz Irradiation

研究者氏名: 山崎 祥他 Shota Yamazaki  
受入研究室: 光量子工学研究センター  
テラヘルツイメージング研究チーム  
(所属長 大谷 知行)

波長が高分子構造に相当するテラヘルツ (THz) 帯の性質を利用した、光照射によるタンパク質高分子構造の操作が本研究の目的である。前年度、ジャ

イロトロンを光源とした0.5 THzの光照射により、水溶液中に存在するアクチンタンパク質の繊維化(高分子構造の形成)を促進させることに成功した。

そこで本年度は、生きた細胞内に存在するアクチンの繊維構造をTHz光照射により操作することができるか検証した。生細胞の経時的な観察を行うには、細胞培養環境（温度、炭酸ガス濃度）を厳密に維持する必要がある。そこで、THz光照射と並行して細胞培養および顕微鏡観察が可能な顕微鏡プラットフォームを新たに構築した。このプラットフォームを使用した細胞へのTHz光照射実験の結果、水溶液中のアクチンと同様に、細胞内に存在するアクチンの繊維形成が促進されることを確認した。さらに、増加したアクチン繊維は細胞遊走に必須となる仮足構造を細胞内で形成することが明らかになった。本研究はTHz光照射によるタンパク質操作の可能性を探索する基礎研究であるが、仮足の形成に伴う細胞運動能の向上は、創傷治癒を促進することが既に知られており、そのためTHz光照射による細胞内アクチン繊維の形成誘導技術は将来的な医療技術への応用が期待できる。

これまで、高分子構造の形成促進作用を示した周波数0.5 THzに加え、今年度は異なるTHz周波数帯の光照射影響の解明にも取り組んだ。これまで実験系を確立したアクチンを利用しTHz光照射実験を行ったところ、4 THzではアクチン繊維の切断が誘起されることを明らかにした。このアクチン繊維の切断現象は、水溶液と細胞内の両方で誘起され、THz光の周波数依存的な高分子構造操作の可能性が新たに示された。

#### ●誌上発表 Publications

### XVIII-033 モリブデン酵素群を標的としたケミカルバイオロジー研究： 植物の新規生理活性物質の同定に向けて

#### Chemical Biology Study on Molybdenum Enzymes for Identification of Novel Bioactive Metabolites in Plants

固着生活を営む植物は常に変動する環境に曝されるが、多様な代謝を駆使することで効率的に環境へ適応している。そのため、植物の代謝は動物と比較しても遥かに複雑で多様性に富んでおり、まさに代

(原著論文)

Hayashi-Takanaka Y., Kina Y., Nakamura F., Yamazaki S., Harata M., Soest RWMV., Kimura H. and Nakao Y.: "Effect of mycalolides isolated from a marine sponge Mycale aff. nullarosette on actin in living cells.", Sci. Rep., 9 7540 (2019)\*

(解説記事)

山崎祥他, "高強度テラヘルツ光による生体内高分子「アクチン繊維」の操作", 光学, Vol. 48 No. 10 pp. 402-406.\*

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

山崎祥他: "テラヘルツ光による衝撃波発生を介した生体高分子の操作", 2019年度衝撃波シンポジウム, 神戸大学, 3月(2020)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

山崎祥他, 保科宏道, 大谷知行: "テラヘルツ光の分光と照射", RAPAC, 和光, 9月(2019)

山崎祥他: "テラヘルツ光による高分子化合物の構造操作", 東北大学&理研 第1回ワークショップ『テラヘルツ光研究の新展開と産業応用への展望』, 東北大学, 10月(2019)

山崎祥他, 原田昌彦, 小川雄一, 大谷知行, 保科宏道: "テラヘルツ光照射による生体内高分子への影響解析", RAPシンポジウム, 和光, 12月(2019)

研究者氏名: 渡邊 俊介 Shunsuke Watanabe

受入研究室: 環境資源科学研究センター

適応制御研究ユニット

(所属長 瀬尾 光範)

謝の多様性こそが植物の生長・生存戦略の基盤といえる。しかし、その複雑さ故に、生理的な役割が明らかでない代謝物も少なくない。そこで私は、『生理活性を持つ代謝物』を植物の成長や形態形成、環



境適応を制御する分子実態と捉えて、その単離・同定および生理活性の解析をこれまでに進めてきた。

生理活性物質が機能発現するためには、「代謝制御による内生量の調節」および「機能発現部位（細胞）への効率的な輸送」の二つのプロセスが重要である。そこで本研究では、生理活性物質の代謝・輸送に関与することが知られているモリブデン酵素（Mo酵素）群と硝酸・小ペプチド輸送体ファミリー（NPF）に着目し、Mo酵素およびNPFの生体内基質の同定を目指す。そのために、組換えタンパク質を用いた *in vitro* 系タンパク質-化合物相互作用の検出プラットフォームを構築し、ターゲットタンパク質とアフィニティーの高い化合物をケミカルライブラリーから探索する。

昨年度は、モデル実験植物シロイヌナズナのMo酵素の活性化に関わるMoCo硫化酵素ABA3と輸送体NPFを高発現する酵母株の作出を試みた。その結果、NPFについては高発現株を単離できたため、本年度は組換えNPFタンパク質の精製条件の検討を行った。複数のアフィニティータグをNPFのN末あるいはC末に融合した組換えNPFタンパク質をアフィニティー精製し、ゲルろ過クロマトグラフィーおよびSDS-PAGEを用いてタンパク質の精製度を評価した。その結果、N末にStrepIIタグを融合したStrepII-NPF-GFPタンパク質の発現量が高くまた精製に適していることが判明した。これらは白水美香子博士ら（理研BDR）との共同研究で、今後は得られた組換えNPFタンパク質を用いてタンパク質-化合物の相互作用検出系を構築すると同時に、NPFの結晶構造解析も進める予定である。

ABA3に関しては、昨年度に引き続き高発現株の作出を試みた。組換えNPFタンパク質の発現・精

製方法の検討結果に鑑みて、StrepII-ABA3-GFP発現用ベクターを構築し、酵母株に導入した。酵母細胞のGFP蛍光強度の測定および抗GFP抗体を用いたウェスタンブロッティングの結果からABA3高発現酵母株を単離することができた。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Adams, E., Miyazaki, T., Watanabe, S., Ohkama-Ohtsu, N., Seo, M., and Shin, R.: "Glutathione and Its Biosynthetic Intermediates Alleviate Cesium Stress in Arabidopsis", *Front. Plant Sci.*, 10: 1711 (2020)\*

Han, Y., Watanabe, S., Shimada, H. and Sakamoto, A.: "Leaf endoplasmic reticulum dynamics modulate  $\beta$ -glucosidase-mediated stress-activated ABA production from its glucosyl ester", *J. Exp. Bot.*, doi: 10.1093/jxb/erz528 (2019)\*

Ueda, M., Matsui, A., Watanabe, S., Kobayashi, M., Saito, K., Tanaka, M., Ishida, J., Kusano, M., Seo, M. and Seki, M.: "Transcriptome Analysis of the Hierarchical Response of Histone Deacetylase Proteins That Respond in an Antagonistic Manner to Salinity Stress", *Front. Plant Sci.*, 10: 1323 (2019)\*

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

Watanabe, S., Kanno, Y., Takahashi, N., Aoi, Y., Kasahara, H., Umeda, M. and Seo, M.: "Identification of an Arabidopsis NRT1/PTR FAMILY protein involved in root gravitropism", The 23rd International Conference on Plant Growth Substances, Paris, Jun (2019)

### XVIII-034 Analysis of 3D biological shapes for the interpretation of structural biology data

Name: Sandhya P. TIWARI

Host Laboratory: Computational Structural Biology Research Team  
RIKEN Center for Computational Science  
Laboratory Head: Florence TAMA

We proposed an alternative computational strategy to efficiently interpret single particle data, by matching a small number of images against a library of biological

shapes. To build a library of biological shapes, we assembled a data set of 3D structures from existing resources, e.g. the Electron Microscopy Data Bank,

which we reduced to a non-redundant set of low-resolution biological shapes with normalized volumes. Then, we simulated theoretical 2D data from this data set of shapes. In the first part of our work, published in 2018, we focused on matching real space images simulated from cryo-EM maps, showing that our strategy is also useful for exploring new cryo-EM data. We were able to retrieve matches for three examples, using five input projection images each, against a small library from 250 shapes. In the second part, we matched five 2D XFEL diffraction patterns each from another three examples, against a library of simulated diffraction patterns from 1628 EM models. As diffraction patterns are in Fourier space, we implemented an algorithm to define the region that captures the overall shape of the particle in the 2D data for matching. We aim to complete this part of the algorithm in FY2020. Moreover, we addressed the often-overlooked parameter of the pixel size in cryo-EM, which describes the magnification of the image produced by the experiment. While efforts are made to refine and validate this parameter in the analysis of cryo-EM experimental data, there is no systematic protocol in place. Since the pixel size parameter can have an impact on the resolution and accuracy of a cryo-EM map, and the atomic resolution 3D structure models derived from it, we propose a computational protocol to estimate the appropriate pixel size parameter. In our protocol, we fit and refine atomic structures against cryo-EM maps at multiple pixel sizes. The resulting fitted and refined structures are evaluated using the GOAP (generalized orientation-dependent, all-atom statistical potential) score,

which we found to perform better than other commonly used functions, such as Molprobit and the correlation coefficient from refinement. Finally, we describe the efficacy of this protocol in retrieving appropriate pixel sizes for several examples; simulated data based on yeast elongation factor 2 and experimental data from Gro-EL chaperone, beta-galactosidase, and the TRPV1 ion channel. Lastly, we wrote a review article summarizing the current status of hybrid/integrative modeling, where I highlighted the future of XFEL data interpretation.

#### ●Publications

- [1] Srivastava, S.P. Tiwari, O. Miyashita and F. Tama, “Integrative/Hybrid Modeling Approaches for Studying Biomolecules”, *Journal of Molecular Biology*, In press (journal pre-proof) (2020).
- [2] S.P. Tiwari, S. Chhabra, F. Tama and O. Miyashita, “Computational protocol for assessing the optimal pixel size to improve the accuracy of single particle cryo-electron microscopy maps”, *Journal of Chemical Information and Modeling*, [Epub ahead of print] (2020).

#### ●Poster presentations

International Conference

S.P. Tiwari, S. Chhabra, F. Tama and O. Miyashita, “COMPUTATIONAL PROTOCOL FOR OPTIMIZING THE PIXEL SIZE PARAMETER TO IMPROVE SINGLE PARTICLE CRYO-ELECTRON MICROSCOPY MAPS”, Biophysical Society Annual Meeting, San Diego USA, Feb 15-19 2020.

XVIII-035

### 酵母の種分化機構におけるフェロモンと受容体の共進化

#### Coevolution of Sex Pheromones and their Receptors in Mechanism of Yeast Speciation

研究者氏名: 清家 泰介 Taisuke Seike  
受入研究室: 生命機能科学研究センター  
多階層生命動態研究チーム  
(所属長 古澤 力)

一つの種からどのようにして新しい種が誕生する  
のかは、進化における最も注目すべき問題の一つで

ある。新しい種の確立には、元々の種との交配を妨  
げる「生殖隔離（二つの個体群の間で何らかの原因

により生殖が起こらない状態)」が重要であり、その原因の一つに性フェロモンの特異性の変化が挙げられる。昆虫・両生類のような動物から酵母のような微生物まで、多くの生物ではフェロモンを使って異性を誘引し交配している。このフェロモンの特異性は、雌雄間の認識に必須であり、フェロモンの構造が変化すると、受容体とは結合できずに異性を引き付けることができなくなる。私は過去に分裂酵母 *Schizosaccharomyces pombe* のフェロモンと受容体遺伝子を協調的に改変することにより、元の野生型集団から生殖隔離された新しい生殖集団を人為的に創ることに成功した (Seike et al., PNAS, 2015)。この実験室での成果は、確かにフェロモンの特異性の変化が生殖隔離を引き起こすことを示したが、自然界においてフェロモンとその受容体が互いに特異性を保ちながら、その組み合わせを変化させる仕組みはほとんど分かっていない。

そこで、本年度は分裂酵母 *S. pombe* を使って、フェロモンに多様性が生まれるプロセスと、フェロモン系の変化によって引き起こされる種分化のメカニズムを実験的に検証した。

(1) 152のフェロモン変異株を同じフラスコ内で混合培養し、様々な環境下で一斉に交配させた。一般的な交配培地で培養を繰り返すと、フェロモンのC末端側の変異は完全に淘汰される一方で、2番目のThr残基が変異した変異株は野生型株よりも有意に存在した。また培地のpHや培養温度を変動させることにより、どのような時に変異株が生き残りやすいかを調べた。こうした一連の実験により、フェロモン分子が多様化しやすい環境条件をある程度探ることができた。

(2) フェロモン受容体GPCRの一部を近縁種間でスワップさせることにより、7回膜貫通領域のうち、6番目の領域がフェロモンの結合に重要であることが分かった。その領域にランダムに変異を導入させ、別種のフェロモンに応答できる改変型GPCRの作製にも成功した。本実験により6番目の膜貫通領域がフェロモンの認識に重要であること、またその領域での変化が近縁種間の種分化を促進させていることが明らかになった。さらにフェロモンと受容体の組み合わせを網羅的に定量する手法として、Cre-loxPを応用した細胞内での組換え反応を利用した遺伝学的解析法を構築した。

## ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Seike T., Maekawa H., Nakamura T. and Shimoda C.: “The asymmetric chemical structures of two mating pheromones reflect their differential roles in mating of fission yeast.”, *J Cell Sci*, 132 jcs230722(2019)\*

Seike T., Kobayashi Y., Sahara T., Ohgiya S., Kamagata Y. and Fujimori KE.: “Molecular evolutionary engineering to improve catalytic activity and performance of *Saccharomyces cerevisiae* xylose isomerase for micro-aerobic glucose/xylose co-fermentation.”, *Biotechnol Biofuels*, 12 139(2019)\*

Fujimori KE., Kobayashi Y., Seike T., Sahara T., Ohgiya S. and Kamagata Y.: “Whole genome sequence of an isogenic haploid strain *Saccharomyces cerevisiae* IR-2idA30(MATa) established from the industrial diploid strain IR-2.”, *Microbiol Resour Anounc*, 8 e00018-19(2019)\*

(総説)

Seike T.: “The evolution of peptide mating pheromones in fission yeast.”, *Curr Genet*, 65 1107-1111(2019)\*

Seike T. and Shimoda C.: “Role of pheromone recognition systems in creating new species of fission yeast.”, *Microb Cell*, 6 209-211(2019)

(その他)

Seike T.: “First person - Taisuke Seike”, *J Cell Sci*, 132 jcs235259(2019)

清家泰介: “優秀ポスター賞「酵母のフェロモンが多様化する仕組みを実験的に探る」”, 日本ゲノム微生物学会ニュースレター, 19 16-18 (2019)

清家泰介: “酵母の巧妙なフェロモン認識システム - 曖昧さが進化の鍵!?”, *academist Journal*, <https://academist-cf.com/journal/?p=10141>

## ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

清家泰介: “酵母の大規模交配実験: フェロモン分子はどのように多様化するか?”, 第13回日本ゲノム微生物学会若手の会, 伊東, 10月 (2019)

清家泰介: “酵母のフェロモンが多様化する仕組み”, 日本動物学会第90回大会, 大阪, 9月 (2019)

清家泰介, 阪田奈津枝, 下田親, 仁木宏典, 古澤力: “近縁種の作るフェロモンを使って, *S. pombe* を交配させる実験的試み”, 酵母遺伝学フォーラム

第52回研究報告会, 清水, 9月 (2019)

清家泰介: “酵母のフェロモンはどのようにして多様化するか?”, 酵母研究若手の会第五回研究会, 和光, 3月 (2019)

●ポスター発表 Poster Presentations  
(学会)

Seike T., Shimoda C. and Niki H.: “Role of pheromone recognition systems to create a new species.”, 10th International Fission Yeast Meeting, Barceló Sants, Jul.(2019)

清家泰介, 仁木宏典, 古澤力: “酵母のフェロモンが多様化する仕組みを実験的に探る”, 第13回日本ゲノム微生物学会年会, 東京, 3月 (2019)

XVIII-036 細菌の実験室進化による形態移行過程における進化原理の解明  
Identification of Molecular Mechanisms Underlying the Evolution of Bacterial Chape Diversity by Experimental Evolution Approaches

研究者氏名: 前田智也 Tomoya Maeda  
受入研究室: 生命機能科学研究センター  
多階層生命動態研究チーム  
(所属長 古澤力)

細菌において形態は、細胞壁であるペプチドグリカン層の形で決まり、ペプチドグリカン (PG) 合成の様式が変化することで形態も変化することが先行研究で明らかになっていた。しかし、PG合成酵素の多くは生育に必須であり、ペニシリンをはじめとした抗生物質のターゲットにもなっている。多くの形態移行進化過程において、PG合成酵素に変異が生じたことは、先行研究の比較ゲノム解析で明らかになっているが、これらの形態移行進化過程において致死的な影響をもたらすPG合成酵素の変異がどのようにして固定されていったのかは現在明らかにされていない。そこで、PG合成阻害剤を用いた細菌の実験室進化を行うことで、形態形成因子の機能不全を許容するように進化した細菌を取得することができると考えた。このような実験室進化の方法と全ゲノム解析や比較ゲノム解析の方法を組み合わせ、細菌の形態移行進化過程を再現して、進化過程で何が生じたのか進化の原因を直接的に検証することを目的とした。

本研究では、独特の形状をした細菌が進化的にどのように出現してきたかを解明するために、リング状形態を示す細菌 *Spirosoma linguale* と、星型形態を示す *Stella* 属細菌を研究対象にしている。昨年度までに様々なPG合成阻害剤存在下で *S. linguale* の実験室進化を行い、形態がコイル型から桿菌形態に近い形状に変化した薬剤耐性進化株を複数取得したため、今年度はまず、これらの形態異常進化株の全

ゲノムリシーケンス解析を行い、形態異常を引き起こす原因遺伝子を同定した。また、この株を基質特異性の高いPBP阻害剤であるアモキシリン存在下で培養すると完全な桿菌に近い形状へと変化するため、アモキシリンのターゲットPBPがコイル状を決定する重要酵素の1つであると考え、現在そのターゲット同定を試みている。

また、星形菌 *Stella* 属の3種に関して、世界で初めて全ゲノム配列の決定を行った。これらのゲノム解析により、星形菌の近縁種を比較ゲノム解析で明らかにし、近縁種は大腸菌のような一般的な桿菌形態であること、及び星形菌が大腸菌を含む桿菌形態のモデル細菌と基本的な細胞骨格形成遺伝子群を保有していることが分かった。これらのことから、細菌の細胞形態は一般的には桿菌形態を示すものの、少数の遺伝子変異で変化しうることが示唆された。

●誌上発表 Publications

(原著論文)

- (1) Atsushi Shibai, Tomoya Maeda\*, Masako Kawada, Hazuki Kotani, Natsue Sakata, and Chikara Furusawa “Complete genome sequences of three star-shaped bacteria, *Stella humosa*, *Stella vacuolata*, and *Stella* Species ATCC 35155.” *Microbiology Resource Announcements*. 8(32). pii: e00719-19. doi: 10.1128/MRA.00719-19. 2019.
- (2) Tomoya Maeda\*, Horinouchi Takaaki, Natsue

Sakata, Aki Sakai, and Chikara Furusawa “High-throughput identification of the sensitivities of an *Escherichia coli*  $\Delta recA$  mutant strain to various chemical compounds.” *The Journal of Antibiotics*. 72:566-573. 2019.

#### ●口頭発表 Oral Presentations

前田智也, 古澤力 「ピルビン酸デヒドロゲナーゼによるバクテリア細胞サイズの制御機構の解明」, 『日本ゲノム微生物学会若手の会』, 静岡, 2019年10月

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(1) 前田智也, 堀之内貴明, 阪田奈津江, 小谷葉月, 酒井亜希, 田邊久美, 古澤力 「全自動培養システムを用いた多種ストレス環境下における大腸菌の大規模進化実験」, 『日本ゲノム微生物学会』, P005, 東京, 2019年3月

(2) Tomoya Maeda and Chikara Furusawa “Identification of mutations conferring resistance to anti-tuberculosis drugs by laboratory evolution of non-pathogenic *Mycobacterium* on agar plate.” *The 20<sup>th</sup> International Conference on Systems Biology*. 2P-013, Okinawa, November 2019

### XVIII-037 **Biomedical Transition from Lab to Clinic: a study of the conditions required to produce safe and functional biomedical grade retinal pigment epithelium (RPE) directly from somatic cells.**

Name: Cody KIME

Host Laboratory: Laboratory for Retinal Regeneration

RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research

Laboratory Head: Eisuke NISHIDA

In 2019, Dr. Kime continued to advance his cell reprogramming research with two model systems: inducible retina pigment epithelium (iRPE) from somatic cells, and inducible 2C-like state derived blastocyst-like-cysts (iBLC). The iBLC system was published in *Stem Cell Reports* demonstrating the induction of 2C genes and synthetic embryogenesis from pluripotent stem cells. Expanding that study, Dr. Kime has carried out extensive new experiments involving metabolism and 2C-like state stability are ongoing with new collaborations in Denmark and Taiwan. Dr. Kime’s iRPE system has received the most focus, with continued stability and RPE-like cell generation in bulk. The RPE-like cells have been transplanted into many albino rats wherein pigmented and *BEST1::EGFP* (maturation reporter) expressing cells were found to grossly survive, integrate, and mature *in-vivo*. Stable iRPE were also prepared along with their donor cell type, fibroblasts, and a positive control model of iPS-derived RPE (iPS-RPE): these 4 cultures were sampled for 10X Chromium 5’ scRNA-seq experiments with very high-quality libraries aligned to the human genome. Initial NGS

analysis shows promising results that among stably reprogrammed cells, many iRPE are very similar to iPS-RPE with respect to numerous molecular criteria.

Dr. Kime also led his team to revisit epigenetic regulation and plasticity in cell reprogramming with drugs/small-molecules that are known to increase cell plasticity. Interestingly, for the most part, the core iRPE reprogramming system and medias may be superior to the effects of such drugs as several experiments controlling for dosage found either no effect, or toxicity, across the range of doses, and little to no observable reprogramming improvement. Some experiments with WNT pathway modulation had colony efficiency gains and other minor effects, and thus such iRPE reprogramming experiments with WNT continue at lower priority.

Dr. Kime also optimized new media/transfectant conditions for bi-daily mRNA-based reprogramming to prepare the iRPE system for biomedical grade and automated applications. Several iRPE and candidate reprogramming factors were produced as mRNAs for use in this system. Dr. Kime has also developed new

theoretical approaches for reprogramming retinal cells in-vivo toward the future medicine of in-vivo eye regeneration. Dr. Kime continued service as a staff reviewer for the journal Bio Protocol.

#### ●Publications

Kime, C., Kiyonari, H., Ohtsuka, S., Kohbayashi, E., Asahi, M., Yamanaka, S., Takahashi, M., and Tomoda, K.: *Induced 2C Expression and Implantation-Competent Blastocyst-like Cysts from Primed Pluripotent Stem Cells*. *Stem Cell Reports*, 13, 485-498 (2019). published\*

Kitahata, S., Tanaka, Y., Hori, K., Kime, C., Sugita, S., Ueda, H., and Takahashi, M.: *Critical Functionality Effects from Storage Temperature on Human Induced Pluripotent Stem Cell-Derived Retinal Pigment Epithelium Cell Suspensions*. *Nature Scientific Reports*, 9, 1-15 (2019). published\*

#### ●Oral Presentations

Kime, C.: *Induced 2C Expression and Implantation-Competent Blastocyst-like Cysts from Primed Pluripotent Stem Cells*. *Control and Design of Biosystems / RIKEN BDR Symposium 2019, Kobe, Japan, March (2019)*.

Kime, C.: *Induced 2C Expression and Implantation-Competent Blastocyst-like Cysts from Primed Pluripotent Stem Cells*. *ISSCR (International Society for*

*Stem Cell Research) Annual Meeting 2019 / Los Angeles, California, USA, June (2019)*.

Kime, C.: *Establishing Cell Plasticity and Reprogramming Systems to Enable Biosystems Dynamics Discovery*. *RIKEN BDR Retreat, Awaji, Japan, October (2019)*.

#### ●Poster Presentations

Kime, C.: *Induced 2C Expression and Implantation-Competent Blastocyst-like Cysts from Primed Pluripotent Stem Cells*. *Stem Cells & Organoids in Development and Disease / ISSCR (International Society for Stem Cell Research) 2019 / Amsterdam, Netherlands, February (2019)*.

Kime, C.: *Induced 2C Expression and Implantation-Competent Blastocyst-like Cysts from Primed Pluripotent Stem Cells*. *Control and Design of Biosystems / RIKEN BDR Symposium 2019 / Kobe, Japan, March (2019)*.

Kime, C.: *Establishing Cell Plasticity and Reprogramming Systems to Enable Biosystems Dynamics Discovery*. *RIKEN BDR Retreat / Awaji, Japan, October (2019)*.

Kime, C.: *Induced 2C Expression and Implantation-Competent Blastocyst-like Cysts from Primed Pluripotent Stem Cells*. *iPSCs Changing the Future of Science and Medicine / CiRA 2019 International Symposium / Kyoto, Japan, November (2019)*.

## XVIII-038

### 比較オミクス解析を活用したヒト脱分化脂肪細胞の 生理活性物質による神経分化誘導

#### Bioactive Ligands-Based Neuronal Reprogramming of Human DFATs

研究者氏名: 中野 令 Nakano Rei  
受入研究室: 生命医科学研究センター  
細胞機能変換技術研究チーム  
(所属長 鈴木 治和)

本研究では、新しい細胞源である脱分化脂肪細胞の神経リプログラミング技術を達成するために、まず、イヌの脱分化脂肪細胞における神経リプログラミングについて検討を行った。イヌ脱分化脂肪細胞の神経リプログラミングに必要な因子をスクリーニングした結果、これまで研究代表者らが報告した

bFGFを基本とした分化方法にレチノイン酸を添加することで、神経分化が起こることを見出した。さらに、リプログラミング過程に関わるメカニズムを解明するために、RNA-seqによる網羅的トランスクリプトミクス解析とパスウェイ解析を行った。すると、イヌ脱分化脂肪細胞の神経リプログラミング

ではMAPキナーゼ経路のひとつであるJNK経路が関与することが示唆された。阻害剤によるスクリーニングを行うと、JNK阻害剤であるSP600125処理によって神経リプログラミングが抑制された。JNKにはJNK1、JNK2、JNK3の3つのサブタイプが存在するが、サブタイプ特異的な機能については明らかになっていない。そこで、JNKサブタイプ特異的なsiRNAを用いて、ノックダウン実験を行いイヌ脱分化脂肪細胞の神経リプログラミングへの関与を検討した。JNK3 siRNAノックダウン細胞では神経リプログラミングが抑制されたが、JNK1およびJNK2ノックダウンは影響が見られなかった。これまで、JNK3は脳タイプJNKとして知られていたが、機能については不明であった。本研究の結果から、レチノイン酸およびbFGFによる神経リプログラミングに関与していることが明らかとなった。以上から、レチノイン酸およびbFGFはJNK3経路を介して神経リプログラミングプロセスを活性化していることが明らかとなった。

また、ヒト脱分化脂肪細胞の神経リプログラミングに関して、申請者らが見出したイソキサゾール化合物の効果を検討した。ヒト脱分化脂肪細胞をイソキサゾール体で処理すると、時間および濃度依存的に神経マーカーのmRNA発現を誘導することが明らかとなった。今後は、さらに細胞の機能解析について詳細な検討を進めていく予定である。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Nanako Kitanaka, Rei Nakano (equally contributed author), Manabu Sakai, Taku Kitanaka, Shinichi Namba, Tadayoshi Konno, Tomohiro Nakayama, Hiroshi Sugiya. ERK1/ATF-2 signaling axis contributes to interleukin-1 $\beta$ -induced MMP-3 expression in dermal fibroblasts. PLOS ONE. 14:e0222869, 2019. doi:10.1371/journal.pone.0222869. \*

Nanako Kitanaka, Rei Nakano (equally contributed author), Kanae Sugiura, Taku Kitanaka, Shinichi Namba, Tadayoshi Konno, Tomohiro Nakayama, Hiroshi Sugiya. Interleukin-1 $\beta$  promotes interleukin-6 expression via ERK1/2 signaling pathway in canine dermal fibroblasts. PLOS ONE. 14:e0220262. 2019. doi: 10.1371/journal.pone.0220262. \*

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(招待講演)

Rei Nakano, The development of neuronal reprogramming systems of canine somatic cells for functional regeneration in companion animals, Center Seminar in NUVERC, Japan, May 2019.

Rei Nakano, Bioactive ligands-based neuronal reprogramming in human and canine dedifferentiated fat cells (DFAT), Seminar in Asahi University School of Dentistry, Japan, March 2019.

(学会)

- 久慈愛, 中野令, 杉村真奈, 八竹直哉, 難波信一, 北中菜菜子, 今野忠好, 北中卓, 高橋朋子, 中山智宏, 杉谷博士, イヌ悪性黒色腫細胞のTRPA1を介した細胞死におけるPLD1の関与, 第162回日本獣医学会, 2019年9月
- 八竹直哉, 中野令, 久慈愛, 杉村真奈, 難波信一, 北中菜菜子, 今野忠好, 北中卓, 高橋朋子, 中山智宏, 杉谷博士, イヌメラノーマ細胞におけるIL-1 $\beta$ 刺激によるMMP-3発現, 第162回日本獣医学会, 2019年9月
- 中野令, 北中卓, 難波信一, 北中菜菜子, 今野忠好, 杉谷博士, イヌ滑膜由来線維芽細胞におけるNF- $\kappa$ B依存性ERK1/2核移行を介したCOX-2発現, 第162回日本獣医学会, 2019年9月
- 中野令, ヒト成熟脂肪細胞の生理活性物質による神経リプログラミング, 第2回新学術若手ダイバースワークショップ, 2019年2月

XVIII-039

### IL-4による新規NK細胞活性化機構とその生理的意義の解明

#### Elucidation of the Novel Activation Mechanism of NK Cells by IL-4 and Its Physiological Significance

研究者氏名: 木庭 乾 Kiniwa Tsuyoshi  
受入研究室: 生命医科学研究センター  
自然免疫システム研究チーム  
(所属長 茂呂 和世)

我々は、ウイルス感染などの1型免疫応答で活性化することが知られてきたNK細胞に、IL-4依存的に活性化し、アレルギーや寄生虫感染などの2型免疫応答に対し抑制的に働く亜群 (IL-4-NK) が存在することを報告した (Kiniwa T *et al.*, PNAS, 2016)。本年度はIL-4 NKの抑制標的であると予想しているILC2に着目し、その抑制機構について解析を行なった。

当研究室で保有する、ILC2を含む数10種類もの主要な免疫細胞を比較したRNAseqデータを解析したところ、ILC2およびTh2細胞においてセロトニンの受容体の1つであるHtr1bが特徴的に高発現していることが明らかになった。単離したILC2およびTh2細胞をセロトニンで刺激するとアレルギー性炎症の誘導に重要なIL-5やIL-13の産生が減少したことから、セロトニンはILC2およびTh2細胞に対して抑制作用を持つことが明らかになった。真菌

誘導性の喘息モデルマウスにセロトニンを鼻腔内投与すると、ILC2とTh2細胞の細胞数やサイトカイン産生が有意に抑制されるとともに、好酸球浸潤やムチン産生といった喘息症状が顕著に改善したことから、セロトニンは*in vivo*でもアレルギー抑制因子として働くことが示唆された。また、組織学的解析から、喘息モデルマウスにおいて定常状態のマウスには存在しないセロトニン強陽性の細胞が出現することが明らかになったことから、アレルギー性炎症に伴いセロトニンを介した負のフィードバック機構が働き、過剰な炎症が抑制されている可能性が示唆された。

#### ●ポスター発表 Poster Presentations (学会)

Tsuyoshi KINIWA, Kazuyo MORO: "A novel suppression mechanism for group 2 innate lymphoid cells by serotonin.", 第48回日本免疫学会, 浜松, 12月(2019)

XVIII-040

### Development of Ultra-high Efficiency AlGaIn Deep-UV Emitters using Nano-photonic Light Extraction Scheme

Name: Joosun YUN

Host Laboratory: Quantum Optodevice Laboratory  
RIKEN Cluster for Pioneering Research  
Laboratory Head: Hideki HIRAYAMA

In order to obtain highly efficient AlGaIn Deep-UV emitters, it is essential to increase the generated photon numbers per time in a unit area of quantum well (QW). However, many AlGaIn-based photonic devices such as light-emitting diodes (LEDs) and Quantum cascade lasers (QCLs) have been reporting phenomena related to the strong electron scattering processes which can disturb the efficient photon generation of the target devices. In this fiscal year, we focused on investigating

the additional scattering mechanism in the AlGaIn-based quantum well system, which barely exists in the matured material system, such as GaAs-based heterostructure devices.

Firstly, we derived the dipole scattering self-energy for non-equilibrium Green's function (NEGF) simulation in order to investigate how largely carrier transport is influenced by the dipole scattering process. Extracted results showed that the consideration of dipole scat-



tering would be important more and more as the Al compositional ratio of quantum well approaches near between 0.5 and 0.6. However, this dipole scattering was not so strong enough to block the intersubband transition of electron or to trigger electron overflow. The calculated full-width half-maximum (FWHM) of the spectral density was about 37 meV in the case of  $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$  superlattice structures when polar optical phonon (POP), interface roughness, and dipole scattering were considered for the NEGF simulation. Secondly, we calculated the magnitude of the random electric field generated due to the interface roughness of GaN/AlGaN QWs. From this calculation, we revealed that the total root-mean-square of the random electric field induced by the disorder of interfaces is unexpectedly large, i.e., sub-mega-volt per centimeter, even at 0.1 Al compositional ratio in an AlGaN barrier. The very high magnitude of the random electric field may contribute to both the difficulty of the intersubband transition of GaN/AlGaN QCLs and the efficiency droop of AlGaN-based LEDs. Also, these high field magnitudes can contribute to the polarization-induced doping based on the Poole-Frenkel effect.

In conclusion, we arrived at an important conclusion that the roughness-induced piezoelectric charges may be a major scattering source in AlGaN QW devices. Unintended strong random electric-field generated by these random charges can influence the polarization doping, auger scattering, and carrier overflow, which have frequently observed in the AlGaN QW system. On the other hand, we can infer that the roughness-induced charge may be related to the strong scattering phenomena in all ternary or quaternary GaN-based QWs such as InGaN or AlInGaN. Further investigation will be necessary to advance the related physics.

## ●Publications

### Original Papers

Yun J., and Hirayama H.: Random electric field induced by interface roughness in GaN/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  multiple quantum wells. *Appl. Phys. Express* 12, 124005 (2019) published. \*

Yun J., and Hirayama H.: Level broadening by dipole scattering and its influence to the carrier transport in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N} / \text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$  superlattice structures, *AIP Advances* (2019) submitted. \*

## ●Oral Presentations

### Conferences

Yun J., and Hirayama H.: “AlGaN metasurface to increase the light-extraction efficiency of deep ultraviolet light-emitting diodes by perfect transmittance before critical angle” SPIE Photonics Europe, Strasbourg France 2020, Mar. 29-Apr. 2.

## ●Poster Presentations

### Conferences

Yun J., and Hirayama H.: “Influence of dipole scattering to level broadening and carrier transport in AlGaN-based superlattice structures” APWS, Okinawa Japan 2019, Nov. 10-15.

Yun J., and Hirayama H.: “Level broadening by dipole scattering in AlGaN/AlGaN superlattice structures” ITQW 2019, Ojai California USA 2019, Sep. 15-20.

Yun J., and Hirayama H.: “GaN/AlGaN based THz-QCL taking into account an interface roughness scattering” the 7<sup>th</sup> RAP symposium, Wako-shi Japan 2019, Dec. 9-10.

Yun J., and Hirayama H.: “Design and analysis of DUV-LEDs and QCLs by utilizing HOKUSAI”, the All-RIKEN workshop, Wako-shi Japan 2019, Dec. 5-6.

**Development of Time Resolved STM-THz-TDS System for  
Studying the Ultrafast Carrier Dynamics of Graphene Name:  
Rafael JACULBIA (in upper case)**

Name: Rafael JACULBIA

Host Laboratory: Surface and Interface Science Laboratory  
RIKEN Cluster for Pioneering Research  
Laboratory Head: Yousoo KIM

In the previous fiscal year 2018-2019, I successfully finished establishing a terahertz time domain spectroscopy setup (THz-TDS) setup for the project. This included the design and optimization of the optics setup as well as writing LabVIEW program as a user interface with the setup. Previously, I have used a InAs wafer as a THz emitter and a low temperature grown GaAs photoconductive antenna (PCA) as a detector. Although I found that this setup can work fine, I decided to improve on this setup more for this year. I changed the emitter from an InAs wafer to a GaAs PCA as well. The biggest advantage of this is that the PCA antenna requires much less pump power than the InAs wafer. Owing to this, the setup can produce a much more stable signal since the fluctuations of the femtosecond laser source doesn't affect much the emitted THz intensity.

The main focus of this year is the coupling the terahertz light to the scanning probe microscope (SPM) tip. For this experiment, a gold tip prepared using electrochemical etching was used. I found that the alignment of the THz light into the tip posed a great challenge since the THz light is invisible. For alignment purposes, a small ( $1 \times 1 \mu\text{m}$ ) gold sample was used. This was prepared by first evaporating gold on a glass slide and removing the Au on other areas while keeping a  $1 \times 1 \mu\text{m}$  square at the center. I found that this is an effective sample for the purposes of alignment. After the alignment was optimized, the sample was changed to graphene on Au(111). On this sample, I successfully found a modulated signal based on the oscillation of the SPM tip. This is a clear indication the THz light have been successfully coupled with the tip. The tip distance dependence and found that it nicely correlates to what is shown in literature. Also, in this FY, I had significant contribution on a paper that we published in the Journal

of Applied physics, in this paper, we studied the effects of the semiconductor interface on the THz emission characteristics of GaAs. This paper would contribute to the future design of more efficient semiconductor THz emitters. Also, in this FY, our paper on tip-enhanced Raman spectroscopy in low temperature, ultrahigh vacuum environment was accepted in Nature nanotechnology. In this contribution, we report on the first single molecule resonance Raman effect combined with single molecule absorption previously developed in our group.

#### ●Publications

##### Papers

1. Balgos M. H., Jaculbia R., Prieto E. A., Tani M., Estacio E., Salvador A., Somintac A., Hayazawa N., and Kim Y.: "Atomically-resolved interface imaging and terahertz emission measurements of gallium arsenide epilayers." *Journal of Applied Physics* 126, no. 23 (2019), 235706.
2. Jaculbia R., Imada H., Miwa K., Iwasa T., Takenaka M., Yang B., Kazuma E., Hayazawa N., Taketsugu T., Kim Y.: "Single molecule resonance Raman effect in a plasmonic nanocavity", Accepted in *Nature Nanotechnology*\*

#### ●Oral Presentations

##### Conferences

1. Jaculbia R., Imada H., Miwa K., Yang B., Kazuma E., Hayazawa N., Kim Y.: Vibrationally resolved imaging of a single molecule using tip-enhanced Resonance Raman spectroscopy, Oral, 10th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS10), Auckland, New Zealand, Jul. (2019).
2. Jaculbia R. B., Imada H., Miwa K., Iwasa T., Takenaka M., Yang B., Kazuma E., Hayazawa N., Ta-

ketsugu T., Kim Y.: Vibrational symmetry of a single molecule revealed by tip-enhanced Raman spectroscopy, 2019年第80回応用物理学会秋季学術講演会, 北海道札幌市, 9月18日 (2019).

3. Imada H., Miwa K., Iwasa T., Takenaka M., Yang B., Kazuma E., Hayazawa N., Taketsugu T., Kim Y.: Single molecule tip-enhanced Resonance Raman spectroscopy in low temperature environments, R. B. Jaculbia, Philippine-Japan Conference on Photonics

and Optical materials, Quezon, Philippines, Dec. (2019).

#### ●Poster Presentations

Conferences

1. Jaculbia R. B., Tip-enhanced resonance Raman imaging of a single molecule, 「物質階層原理研究」 & 「ヘテロ界面研究」合同春合宿, 御殿場市, 5月11日 (2019).

XVIII-042

### 抗癌活性を持つ新規スマート高分子ミセルの開発： トリプルシナジー効果による癌治療への挑戦

#### Design and Development of Anti-Cancer Smart Polymeric Nanomedicine that Allows Triple Synergistic Effect on Cancer Cure

研究者氏名: 金榮鎮 Young-Jin Kim

受入研究室: 開拓研究本部

前田バイオ工学研究室

(所属長 前田 瑞夫)

本研究課題では、より高効率な癌治療が可能な刺激応答性を持つ高分子自己集合体ミセルの設計と開発にその目的がある。温度に応じて物性の変化制御が可能なスマートな性質・特性を用いて三つのそれぞれの癌治療方法（薬物治療、遺伝子治療、人工的アポトーシス）の組み合わせと、それらのシナジー効果を生み出せ、癌治療の効果を極大化させる治療剤としての新規高分子ナノメディシンの開発を目指し、研究を進めた。

詳しくは、すべての材料のベースになる温度応答性高分子としてPEOz(poly(2-ethylene-2-oxazoline)の重合を行った。環状のモノマーに重合開始剤の存在下で反応させることでPEOzを重合させた。ここで、二つの異なる開始剤 (potassium iodideと methyl p-toluene-sulfonate) を用いることでPEOzの末端に官能基 (COOHとOH) を有するPEOzの重合に成功した。官能基を有するPEOzの末端修飾を行い新たな官能基や機能をつけることが可能である。本研究では、得られたPEOzの末端を修飾させた後、目的である3種類の高分子の重合を行った (① PEOz-*b*-PPEEA: Cation polymer for gene therapy, ② PEOz-*hyd*-DOX: Doxorubicin-conjugated pH-re-

sponsive PEOz for chemotherapy, and ③ PEOz-*hyd*-PS: PS-conjugated pH-responsive PEOz for artificial apoptosis inducing)。得られた3種類の高分子の化学構造を<sup>1</sup>H-NMRで確認し、重合の成功が確認できた。

次のステップとして高分子ミセルの作成を行った (thin-film hydration method)。詳しくは、有機溶媒にすべての高分子を一度溶かした後、溶媒を全て蒸発させ薄い高分子膜を作成した。純水 (70 °C) に再度溶解させた後、超音波をかけることで高分子ミセルの作成ができた。得られた高分子ミセルの直径をDLS (Dynamic Light Scattering) で測定した結果、およそ224.0 nm (25 °C) であった。一方で、温度がLCST (lower critical solution temperature) 以上の直径はおよそ139.3 nm (70 °C) に変化することが確認できた。この結果は、主な材料であるPEOzの温度応答性に起因すると考えられ、昇温に応じてPEOzの分子が疎水化され高分子ミセルの直径が縮んでいると考えられる。今後は、温度応答性を持つ高分子ミセルの生体適合性を細胞実験で検討していく方針である。

## Development of Terahertz Multifunction Devices with Nanocarbon Materials

研究者氏名: 鈴木大地 Daichi Suzuki  
 受入研究室: 創発物性科学研究センター  
 量子効果デバイス研究チーム  
 (所属長 石橋 幸治)

電磁波の特性はその周波数帯によって千差万別に変化し、それゆえ様々な応用例を見せる。この中で、テラヘルツ (THz: Terahertz) 帯から遠赤外 (FIR: Far-infrared) 帯と呼ばれる周波数領域に位置する電磁波は、電波の透過性と光波の直進性の両方を併せ持つこと、水や有機高分子の指紋スペクトルを有すること、量子効果のエネルギー準位と一致することから、基礎科学の解明や非破壊検査等への応用が期待されている。これらの応用実現には THz 波を効率よく検出するデバイスの開発が必要不可欠であり、電子型や熱型といった様々な検出原理にもとづくデバイス研究が行われている。本研究では、グラフェンやカーボンナノチューブに代表されるナノカーボン材料における量子効果を活用することで、高感度・広帯域検出や分光機能、ウェアラブル化や多素子集積化 (カメラ化) といった機能をもたせた THz-FIR 帯デバイスの開発に取り組む。今年度は主にカーボンナノチューブ自立膜の THz-FIR 帯電磁波に対する吸収特性の解明や熱電特性の向上、安定化といった物性研究に取り組んだ。

THz-FIR 帯電磁波の光エネルギー (数~数 10 meV) はカーボンナノチューブのバンドギャップよりも小さいため、吸収メカニズムは主にカーボンナノチューブ長さ方向のプラズモン共鳴が支配する。今年度の研究では、積層膜を構成するカーボンナノチューブの長さ・バンドル径・配向・キャリア濃度等の物性値が THz-FIR 帯電磁波の吸光度に与える影響を明らかにし、化学ドーピングによりカーボンナノチューブの吸光度及び熱電特性を改善することで THz-FIR 帯デバイスの高性能化を達成した。

しかし年度後半において、化学ドーピングを施したカーボンナノチューブを大気下で保管しておくところ 3 ヶ月程度でドーブが抜けて性能が劣化するという問題が明らかになった。そこで解決策として、ドーブ済みのカーボンナノチューブを高分子膜 (パリレン) でコートする手法を提案し、大気暴露を防ぐこ

とで THz-FIR 帯デバイスの長期間性能安定化の実現に取り組んだ。

来年度は上記手法により 1 年以上の性能安定化を目指すとともに、高性能・長期安定な THz-IR 帯撮像デバイス・熱電デバイスの作製に取り組む。

## ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Suzuki D., Ishibashi K. and Kawano Y.: "Broadband Bendable Terahertz Camera for Built-in Infrastructure Sensor", IEEE conference proceedings, 44th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves, Tu-Po2-81(2019)\*

(総説)

Suzuki D., Kawano Y.: "Flexible terahertz imaging systems with single-walled carbon nanotube films", Carbon, 162 13-24(2020)\*

## ●口頭発表 Oral Presentations

鈴木大地, 石橋幸治, 河野行雄: "テラヘルツ分析技術の進展と社会実装に向けたデバイス開発", 第 55 回 X 線分析討論会, 福島, 10 月 (2019)

鈴木大地: "テラヘルツ技術の進展と社会実装に向けたデバイス開発", 九州大学分子・物質合成プラットフォームセミナー, 福岡, 11 月 (2019)

鈴木大地, 石橋幸治, 河野行雄: "カーボンナノチューブ積層膜によるテラヘルツ-赤外フレキシブル撮像デバイス", 電子情報通信学会電子デバイス研究会, 宮城, 12 月 (2019)

## ●ポスター発表 Poster Presentations

Suzuki D., Ishibashi K. and Kawano Y.: "Flexible terahertz camera with micro scale free standing carbon nanotube film array", 20th International Conference on the Science and Application of Nanotubes and Low-Dimensional Materials, Würzburg, Germany,

Jul.(2019)

Suzuki D.: “Flexible Photothermoelectric Devices toward Broadband Sensor and Energy Harvesting”, 9<sup>th</sup> CEMS Research Camp, Kumagaya, Japan, Aug. (2019)

Suzuki D., Ishibashi K. and Kawano Y.: “Broadband Bendable Terahertz Camera for Built-in Infrastructure Sensor”, 44th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves, Paris, France

Sep.(2019)

鈴木大地, 石橋幸治, 河野行雄: “任意対象に貼付け可能なフレキシブルテラヘルツライブカメラの開発”, 第80回応用物理学会秋季学術講演会, 北海道, 9月(2019)

鈴木大地, 石橋幸治, 河野行雄: “テラヘルツ-赤外線フレキシブルライブカメラの開発”, テラヘルツ科学の最先端VI, 東京, 11月(2019)

## XVIII-044 非標準型光格子による平坦バンド中のボース気体の振舞いの解明

### Revealing the Behavior of Bose Gases in a Flat Band of Non-Standard Optical Lattices

研究者氏名: 小沢 秀樹 Ozawa, Hideki  
受入研究室: 創発物性科学研究センター  
量子多体ダイナミクス研究ユニット  
(所属長 福原 武)

正方格子などの通常の格子構造は有限なバンド分散をもっている。そのような格子にボース・アインシュタイン凝縮体 (Bose-Einstein Condensate, BEC) を導入すると、BECは有限なバンド分散をもつ基底バンド構造の中の、最低エネルギーに対応する運動量点に凝縮する。一方で基底バンドが平坦な場合は、どの運動量点にBECが分布するのか、そもそもボース凝縮するのかという興味深い疑問が生じる。本研究では、この問題に対して実験的に解を与えることを目指す。基底バンドに分散の無い、平坦なバンドをもつ格子構造を光の干渉を使って実現し、その光学系にレーザー冷却されたボース気体を導入することで、平坦バンド中のボース気体の振舞いを解明することを目的とする。平坦なバンドをもつ格子構造の中でも、基底バンドを平坦バンドにできるカゴメ型格子やのこぎり型格子を光で構築する。光の干渉を使ってできた格子 (光格子) は、シンプルでかつクリーンな系であるため理論との整合性が良い。また、光格子中の冷却原子系は非常に高いパラメータの自由度を持っている。以上のような理由から、非標準型光格子中の冷却原子気体を用いて、平坦バンド中のボース気体の振舞いをシミュレートできると考えている。

本年度は、平坦バンドをもつ格子構造のベースとなる三角格子構造を3本のレーザー光の干渉によっ

て生成した。さらに、三角光格子中の<sup>87</sup>Rb原子に対してラマンサイドバンド冷却 (Raman Sideband Cooling, RSC) を実装した。近年、光格子中の冷却原子の使った量子シミュレーションにおいて、各格子点の単一原子からの発光を観測することができる量子気体顕微鏡 (Quantum Gas Microscope, QGM) の技術が要となっている。本研究でもこの観測手法を用いることで、より正確に相図が描くことが可能になる。QGMでは発光観測の際に、光子の吸収と放出による加熱が伴うので、これを抑えるためにRSCを用いた。RSCは、光格子中のある振動準位 $n$ とその一つ下の振動準位 $n-1$ をラマン遷移で結合することで、原子が分布する振動準位が下がるという冷却機構である。RSCを実装したことで、発光観測中の原子の寿命が伸び ( $>7$ sec)、長時間の露光が可能になった。今後は、RSCのパラメータを最適化することで発光量を増やし、光格子中の単一原子の単一格点からの発光を観測することを目標とする。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Shintaro Taie, Tomohiro Ichinose, Hideki Ozawa, and Yoshiro Takahashi : “Spatial adiabatic passage of massive quantum particles in an optical Lieb lattice”,

Nature Communications, in print.

●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

Hideki Ozawa, David C. Nak, Ryuta Yamamoto, and

Takeshi Fukuhara: “Raman-sideband Cooling in an Optical Triangular Lattice”, The 4<sup>th</sup> Kyoto-Beijing-Tokyo Workshop on Ultracold Atomic Gases, October (2019)

XVIII-045

抑制性クロマチン修飾 H3K9me3 の維持機構と  
H3K9me3 による転写抑制機構の解明

Elucidation of mechanism for maintenance of H3K9me3  
and transcriptional repression by the histone modification

研究者氏名: 福田 溪 Fukuda Kei  
受入研究室: 開拓研究本部  
眞貝細胞記憶研究室  
(所属長 眞貝 洋一)

ヒストンタンパク質の化学修飾は転写制御に重要な働きを担い様々な生命現象に関与している。ヒストンH3のリジン9番目のトリメチル化 (H3K9me3) は代表的な抑制性ヒストン修飾で、レトロエレメントの抑制やゲノム安定性の維持に関与している。2010年に受入研究室では、マウス胚性幹細胞(Mouse embryonic stem cell, mESC) において、ヒストンメチル化酵素の *Setdb1* が様々なレトロエレメント上に H3K9me3 を入れ、転写を抑制することを明らかにした。しかし、細胞分裂を通して H3K9me3 が維持される機構や H3K9me3 がどのように転写を抑制しているかは未だ不明であり、これらの過程には未知の因子が関与している可能性がある。そこで、申請者は H3K9me3 による転写抑制機構に関わる因子のスクリーニング法を確立し、新規レトロエレメント抑制因子 *Resf1* を同定した。

本年度は *Resf1* の生体内での機能を明らかにするため、*Resf1* 欠損マウスの表現型解析を行った。

*Resf1* 欠損マウスは胎盤重量の顕著な低下を呈し、出生前後に致死となった。*Resf1* 欠損マウスの胎盤の組織学的解析より、*Resf1* は spongiotrophoblast 層の形成に重要な働きを担うことが明らかとなった。次年度は、*Resf1* 欠損細胞の胎盤におけるエピゲノム・トランスクリプトーム解析を行い、胎盤エピゲノムの形成における *Resf1* の役割を明らかにしたい。

●誌上発表 Publications

原著論文

Ohishi H, Au Yeung WK., Unoki M., Ichianagi K., Fukuda K., Maenohara S., Shirane K., Chiba H., Sado T. and Sasaki H., “Characterization of genetic-origin-dependent monoallelic expression in mouse embryonic stem cells.”, *Genes Cells*. 2019 Nov 16. doi: 10.1111/gtc.12736.

## XVIII-046 DNA ペイント法を用いたRNA ポリメラーゼとエンハンサーアセンブリの超解像イメージングと1分子キネティクス解析

### DNA-PAINT Super-Resolution Imaging of RNA Polymerase and Enhancer Assembly for Single-Molecule Kinetic Analysis

研究者氏名: 藤田 恵介 Keisuke Fujita  
受入研究室: 生命機能科学研究センター  
細胞動態計測研究チーム  
(所属長 柳田 敏雄)

本研究では、細胞個性（細胞の表現系のばらつき）を生み出すとされる確率的なエンハンサーアセンブリの可視化を目指し、そのために必要な超解像顕微鏡技術の開発を行う。細胞個性の予測、制御は、がん細胞の反応のばらつきを考慮した薬剤の開発に応用できることから、トランスレーショナル研究（基礎研究の知見を医療の実現化に生かす研究）の分野で注目されている。細胞の表現系のばらつきの一因とされる確率的なエンハンサーアセンブリは、近年、液-液相分離が重要な役割を果たしていることが明らかとなった。本年度は、このような本研究に関連する研究情勢を踏まえ、本研究を飛躍的に発展させるために、細胞個性に着目したトランスレーショナル研究と液-液相分離で先駆的な研究を行っている Lucas Pelkmans 教授（Department of Molecular Life Sciences, University of Zurich）との共同研究を開始した。本年度に行った研究は以下である。

(1) Pelkmans 研究室で開発された、細胞集団レベルからオルガネラレベルまでの特徴を包括的に観察することが可能な顕微鏡技術に、申請者が構築した1分子解析技術（特にノンパラメトリックベイズモデルに基づく画像処理）を組み込んだ。構築した顕微鏡技術は、集団内で現れる1細胞の表現系と mRNA の種類と局在の相関を明らかにするために用いる。

(2) 細胞内の mRNA の局在を超解像かつ高多重度で観察するための FISH プローブの開発を行った。本研究で開発する FISH プローブは、一定の個数比で数種類の蛍光色素によって修飾されており、その比を利用して分子種を区別することを可能とする。来年度には、(1) で構築した顕微鏡と組み合わせる

ことで、細胞集団内1細胞の高多重度 mRNA イメージングを計画している。

また、本研究で構築したノンパラメトリックベイズモデルに基づく1分子解析法は汎用性が高く、本解析法を応用することで、筋収縮時に起こる筋肉ミオシンとアクチンのサブミリ秒の相互作用の解析を行った。本解析法によって得られた結果は、論文として発表した。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Keisuke Fujita<sup>1</sup>, Masashi Ohmachi<sup>2</sup>, Keigo Ikezaki<sup>3</sup>, Toshio Yanagida<sup>4</sup>, Mitsuhiro Iwaki<sup>5</sup>: “Direct visualization of human myosin II force generation using DNA origami-based thick filaments”, *Communications Biology*, November (2019)

#### ●口頭発表 Oral Presentations

Keisuke Fujita<sup>1</sup>: “Harnessing noise: A common strategy of biomolecules revealed by single-molecule measurements”, Special seminar, Department of Molecular Life Sciences, University of Zurich, June (2019)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

Keisuke Fujita<sup>1</sup>, Michio Hiroshima<sup>2</sup>, Masahiro Ueda<sup>3</sup>, Toshio Yanagida<sup>4</sup>, Mitsuhiro Iwaki<sup>5</sup>: “Super-resolution imaging of epidermal growth factor receptor with DNA-PAIN”, EMBO workshop on Single Cell Biology, Tokyo, May (2019)

## Investigation of structural and dynamical properties of C<sub>60</sub> in ion storage rings RICE and TMU-E upon photon impact

Name: Preeti Manjari MISHRA

Host Laboratory: Atomic Molecular and Optical Physics Laboratory

RIKEN Cluster for Pioneering Research

Laboratory Head: Toshiyuki AZUMA

### Experimental work

#### 1.1: Spectroscopy of PAH anion in ion storage ring:

The proposal is originally aimed to study the quantum dynamical properties of a PAH molecular anion of astrophysical relevance, namely C<sub>60</sub> in gas phase. Upon excitation by external perturbation such as photon collision, the molecular ions are in excited state and de-excite via three possible ways: thermionic emission, evaporation of small neutral fragments or emission of radiation. The post collisional analysis of product ions/neutrals in terms of their decay property over long time scale (thousands of milliseconds) provides information on, population of excited states, lifetime of metastable states, and auto-detachment/delayed detachment processes. The fate of processes is decided by the thermal energy associated with the molecule. Therefore, the studies are proposed for both room temperature (300K) “TMU-E” and cold (4K) “RICE” ion storage ring to understand the effect of thermal energy. Before starting with C<sub>60</sub> (icosahedral symmetry), another small linear molecule (pentacene) from same PAH family is chosen to understand the problem with less complexity in terms of theoretical modelling as well as physical processes involved during experiment. Later the experiment will be extended for the proposed one.

Pentacene (mass 278.36 amu) anion is produced using a Laser ablation source (Nd:YAG laser) and accelerated to 15 keV energy and then injected into TMU-E electrostatic ion storage ring located at Tokyo Metropolitan University. With revolution time of 76 micro-sec, every time the rotating ion bunch is hit by a pulsed laser, if detachment of electron occurs in laser-interaction area of storage ring then neutrals are recorded on a detector for that event in the straight path of ion beam direction. By measuring these neutrals over storage time as well as for different laser excitation wavelength, the absorption spectra are obtained to observe

radiative cooling of hot anion. We have observed that the decay curves of pentacene anion are independent of laser power stating that its due to multiphoton absorption. These results will be explained/confirmed with help of theory (see later).

### Theoretical work

#### 2.1: Theoretical work for vibrational modes of N<sub>2</sub>O cation:

The group at Host laboratory is involved in study of radiative cooling process involved in dissociation of the ro-vibrationally cooled N<sub>2</sub>O molecular cation upon laser excitation. To reproduce the experimental observations (cooling dynamics of different vibrational excited states), there was a demand to obtain the intensity of frequency of vibration of vibrational modes. Using quantum chemistry calculation package GAUSSIAN09 with very advanced basis sets (DFT/ccpVdz) which represent the wavefunctions of molecular orbitals more accurately and then the Schrodinger equation is solved to obtain the optimized geometry of the molecular ion. Further the vibrational modes with their respective intensities is calculated which was used in rate equations to reproduce the experimental observations. The work is part of the manuscript to be submitted for publication.

#### 2.2: Theory for decay rate measurements for pentacene anion:

To understand the competition between electron emission and radiative cooling, using the theoretical code existing in Host laboratory, the detachment rate constant (using principle of detailed balance) as a function of internal energy and decay curves for different storage time are simulated. For this theory model, the inputs such as the vibrational level densities for both neutral and anion, polarizability of neutral molecule, geometry-based capture cross section were obtained. The density of states can be obtained using the frequen-



cy of 102 vibrational modes implementing Beyer-Swinhart algorithm. The frequencies are calculated by me using GAUSSIAN09 package with Density functional theory based on advanced basis sets (DFT/ccpVdz)), The detachment rate constant for experimental time window provides insight to the experimental observations.

#### ●Oral Presentations

Conferences

P. M. Mishra et al, 22nd national conference on atomic and molecular physics, India 2019, March 25-28.

P. M. Mishra et al, Spectroscopy and dynamics group meeting, United Kingdom 2020, January 6-8.

#### ●Poster Presentations

Conferences

P. M. Mishra et al, 「物質階層原理研究」 & 「ヘテロ界面研究」合同春合宿プログラム, Gotemba 2019, May 10-11.

### XVIII-048

#### 軌道縮退系における過冷却電子相の開拓と制御 Exploration and Control of Supercooling Electronic Phase in Orbital Degenerate System

研究者氏名: 松浦 慧介 Keisuke Matsuura  
受入研究室: 創発物性科学研究センター  
動的創発物性研究ユニット  
(所属長 賀川 史敬)

磁性イオンの電子軌道が縮退している遷移金属物質群を軌道縮退系と呼ぶ。本研究課題では、急冷手法を用いることで、軌道縮退系における過冷却な電子相を開拓することを目的とした。これまで急冷手法が適用されてきたのは、主に電荷秩序系や磁気スキルミオン系といった、単一自由度内でフラストレーション（幾何学的あるいは相互作用に関するフラストレーション）を有する系に限られてきた。本研究課題では、強相関電子系の特徴である複数自由度（電荷・スピン・軌道）が競合するような場合に、急冷手法を適用することで、軌道ガラスや軌道液体といったこれまでにない新しい電子相の出現を期待した。今年度は、昨年度に引き続き、軌道縮退系の一つであるマンガン酸化物の急冷効果を主に調べた。基底状態で電荷軌道秩序状態となるペロブスカイト型マンガン酸化物 ( $\text{Nd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$ ) に対して、急冷実験を行った。この物質は、基底状態で反強磁性かつ絶縁体であり、電荷軌道秩序転移点以上では強磁性金属相となる。急冷で電荷軌道秩序転移を動的に避けることで、準安定相としての強磁性金属状態が低温で存在すると期待した。今年度は、立ち上げた電気抵抗（四端子抵抗測定法）と磁化を同時測定でき、かつ電気パルスを用いて急冷実験ができる測定系を用いて、次のような成果が得られた。

(1) 電荷軌道秩序相と強磁性金属相の相境界付近では、0.5 T程度の狭い磁場範囲内において、臨界冷却速度が急速に遅くなることを見出した。

(2) 急冷と徐冷による磁化のスイッチングに成功した。

(3) 過冷却強磁性金属相の緩和過程の中に、異なる時間スケールの緩和過程（早い緩和と遅い緩和）が含まれていることを見出した。

また、今年度は磁気力顕微鏡 (MFM) を用いて、急冷下での磁気像の実空間イメージングを試みた。平衡状態における磁気像の実空間観測に成功し、電荷軌道秩序相と強磁性金属相が共存することが分かった。さらに、MFM内で急冷できる測定系を構築した。

#### ●誌上発表 Publications

1. Keisuke Matsuura, Pham Thanh Cong, Sergei Zherlitsyn, Joachim Wosnitzer, Nobuyuki Abe, and Takahisa Arima, “Anomalous Lattice Softening Near a Quantum Critical Point in a Transverse Ising Magnet”, Phys. Rev. Lett. 124, 127205 (2020) [査読あり]
2. N. Abe, S. Shiozawa, K. Matsuura, H. Sagayama, A. Nakao, T. Ohara, Y. Tokunaga, and T. Arima, “Mag-

netically induced electric polarization in Ba<sub>3</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>5</sub>Cl<sub>2</sub> with tunable direction in three dimensions”, Phys. Rev. B 101, 180407(R) (2020) [査読あり]

3. Keiichi Yano, Takahiro Hanebuchi, Xu-Jie Zhang, Yoshimitsu Itoh, Yoshiaki Uchida, Takuro Sato, Keisuke Matsuura, Fumitaka Kagawa, Fumito Arai, and Takuzo Aida, “Supramolecular Polymerization in Liquid Crystalline Media: Toward Modular Synthesis of Multifunctional Core-Shell Columnar Liquid Crystals”, J. Am. Chem. Soc. 141, 25, 10033–10038 (2019) [査読あり]

#### ●口頭発表 Oral Presentations

1. Matsuura K, “Quenching of Charge-Orbital-Ordered

Manganites”, JPS meeting, Gihu, September (2019) [oral]

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

1. Matsuura K, “Quenching of Charge-Orbital-Ordered Manganites”, CEMS Symposium, Hongo, May (2019) [poster]
2. Matsuura K, “Quenching of Charge-Orbital-Ordered Manganites”, SCES 2019, Okayama, September (2019) [poster]
3. Matsuura K, “Relaxation from quenched ferromagnetic state to charge-orbital-ordered state in manganites”, The 10th CEMS Research Camp on “Dynamics”, Chichibu, July (2019) [poster] 他1件

## XVIII-049 Star Formation across Mass Spectrum and Environments

Name: Yichen ZHANG

Host Laboratory: Star and Planet Formation Laboratory  
RIKEN Cluster for Pioneering Research  
Laboratory Head: Nami SAKAI

My works in this year have been focused on two topics listed in my SPDR research proposal, “disk formation around massive protostars” and “outflow launching and feedback”. On the first topic, I have discovered a bipolar outflow photoionized by a very massive (~50 solar masses) star in formation (G45). The outflow is found to be consistent with a photoevaporation flow carrying angular momentum away from the disk. There are indications of a jet from this source suggesting that, despite of the strong feedback, the accretion is still going on. This challenges the previous beliefs that the strong ionization feedback may terminate the accretion at the late stage of massive star formation. On the second topic, I have observed the HH46/47 molecular outflow and identified multiple wide-angle outflowing shell structures in both blue and red-shifted outflow lobes. These shells are highly coherent in the position-position-velocity space, extending to 40-50 km/s in velocity and 10,000 au in space with well-defined morphology and kinematics. We suggest these outflowing shells are the result of the entrainment of ambient gas by a series of outbursts from an intermittent wide-angle

wind. Episodic outbursts in collimated jets are commonly observed, yet detection of a similar behavior in wide-angle winds has been elusive. Here we have clear evidence that the wide-angle component of the HH 46/47 outflow experiences the same variability seen in the collimated component.

#### ●Publications

Papers

- Zhang Y., Tanaka K. E. I., Rosero V., Tan J. C., Marvil J., Cheng Y., Liu M., Beltrán M. T., and Garay G.: Discovery of a Photoionized Bipolar Outflow towards the Massive Protostar G45.47+0.05, *Astrophys. J. Lett.*, 886, L4 (2019)
- Zhang Y., Arce H. G., Mardones D., Cabrit S., Dunham M. M., Garay G., Noriega-Crespo, A., Offner S. S. R., Raga A. C., Corder S. A.: An Episodic Wide-angle Outflow in HH 46/47, *Astrophys. J.*, 883, 1 (2019)
- Zhang Y., Tan J., Tanaka K., De Buizer J., Liu M., Beltrán M., Kratter K., Mardones D. and Garay G.: Dynamics of a Massive Binary at Birth, *Nat. Astron.*, 3,

517 (2019)

Zhang Y., Tan J., Sakai, N., Tanaka K., De Buizer J., Liu M, Beltrán M., Kratter K., Mardones D. and Garay G.: An Ordered Envelope-disk Transition in the Massive Protostellar Source G339.88-1.26, *Astrophys. J.*, 873, 73 (2019)

### ●Oral Presentations

#### Conferences

Zhang Y., Tan J., Tanaka K., De Buizer J., Liu M, Beltrán M., Kratter K., Mardones D. and Garay G.: “The Envelope-Disk-Outflow System in Massive Protostellar Source G339.88-1.26”, 2019 Spring Annual Meeting of Astronomical Society of Japan, Tokyo Japan 2019, March 14-17

Zhang Y., Tan J., Tanaka K., De Buizer J., Liu M, Beltrán M., Kratter K., Mardones D. and Garay G.: “Massive star formation in 0.03” resolution view of ALMA”, From Stars to Planets II, Gothenburg Sweden 2019, June 17-20

Zhang Y., Tan J., Tanaka K., De Buizer J., Liu M, Beltrán M., Kratter K., Mardones D. and Garay G.:

“Spiraling giants: witnessing the birth of a massive binary star”, 2019 Autumn Annual Meeting of Astronomical Society of Japan, Kumamoto Japan 2019, September 11-13

Zhang Y.: “Probing kinematics of ionized gas around forming massive stars”, NAOJ Next Generation VLA Workshop, Tokyo Japan 2019, September 19

### ●Poster Presentations

#### Conferences

Zhang Y., Tan J., Tanaka K., De Buizer J., Liu M, Beltrán M., Kratter K., Mardones D. and Garay G.: “Massive star formation in 0.03” resolution view of ALMA”, ALMA2019: Science Results and Cross-Facility Synergies, Cagliari Italy 2019, October 14-18

Zhang Y., Sakai N., Higuchi A., Oya Y., López-Sepulcre A., Imai M., Sakai T., Watanabe Y., Ceccarelli C., Lefloch B. and Yamamoto S.: “Rotation in the NGC 1333 IRAS 4C Outflow”, From Stars to Planets II, Gothenburg Sweden 2019, June 17-20

## XVIII-050 ニューラルネットワークが持つ決定論的特性が果たす計算論的役割の解明

### Computational Role of Deterministic Property in Neural Networks

研究者氏名: 寺田 裕 Yu Terada  
受入研究室: 脳神経科学研究センター  
数理脳科学研究チーム  
(所属長 豊泉 太郎)

人間や動物は複数の感覚入力を統合し、適切な行動をとることができる。特に、現実の感覚入力は常に正しいとは限らず、不確実性を備えた確率的な入力であることが多い。そのような不確実性を含んだ感覚入力を受けた際にも人間や動物は複数入力を適切に統合し、必要な情報を推定することができる。確率的に言えば、事前分布を有し、尤度関数を得ることで事後分布を構築していることに対応している。人間や動物において観測されるこの現象は行動レベルで見るとときに Bayes 最適に近い推定として見なすことができ、実際に人間や動物は Bayes 最適に近い行動をとることが多くの研究から示唆されている。一方、脳神経系における神経活動レベルにおい

ても Bayes 最適な推定を行うことが近年の実験において指摘されている。我々はこのような不確実性を伴った推論を適切に行うために、神経回路網が備えるべき学習則の解明を目指した。特に、神経の決定論的な特性から生じる揺らぎ（カオスのダイナミクス）を利用し、パラメータの探索を行うような学習則を提案した。従来の確率的なダイナミクスを利用した学習則でなく、ニューラルネットワークの内部ダイナミクスを利用した学習則を用いることで上記のタスクがどのように実現されるのか、理想化を行った単純なモデルの理論解析とより複雑な数値解析の双方を用いて系統的に調べている。

●誌上発表 Publications

(原著論文)

Terada Y. and Yamaguchi Y.Y.: “Linear response theory for coupled phase oscillators with general coupling functions”, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 53, 044001 (2020).

Terada Y., Obuchi T., Isomura T. and Kabashima Y.: “Objective and efficient inference for couplings in neuronal networks”, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* (2019) 124010.

●口頭発表 Oral Presentations

(国際会議)

Terada Y., Obuchi T., Isomura T. and Kabashima Y.: “Objective and efficient inference for couplings in neuronal networks”, Statistical Physics and Neural Computation on Neural Computation (SPNC-2019), Sun Yat-sen University, China, Oct., 2019.

●ポスター発表 Poster Presentations

(国際会議)

Terada Y., Obuchi T., Isomura T. and Kabashima Y.: “Objective and efficient inference for couplings in neuronal networks”, 40 years of Replica Symmetry Breaking (RSB40), Sapienza University of Rome, Italy, Sep., 2019.

基礎科学特別研究員  
2019年度採用者



## Boundedness of Varieties in Positive Characteristic

研究者氏名: 佐藤 謙太 Kenta Sato

受入研究室: 数理創造プログラム

(所属長 初田 哲男)

本研究は、Fano多様体と呼ばれる特別なクラスの代数多様体に成立するであろう、ある種の一様有界性を検証することを目的としている。この有界性は、標数0においては約30年前に証明されており、今や標数0のFano多様体の研究において欠かすことの出来ない重要な性質である。しかし、正標数においては低次元の場合を除き、この有界性に関してはほとんど何もわかっておらず、正標数の多様体を研究する上で重大な障害となっている。今年度はまず、正標数のFano多様体の有界性を示す為の試金石として、Fano多様体上の大域的な不変量の有界性に注目し研究を行った。特に高木俊輔氏との共同研究において、ホッジ数と呼ばれるコホモロジカルな不変量について考察し、3次元の場合には多くのホッジ数が0であることを証明した。その鍵となったのは、秋月中野消滅定理の正標数化を3次元で成功したことである。一方で、本研究課題の特色の一つは、有界性という大域的な性質に、特異点論からのアプローチを試みることである。この方針で重要な役割を果たす、F純閾値という特異点の不変量の性質、とりわけ、その不変量の無限列の極限に成立する性質を調べた。この研究の中で、標数0とはまるで異なる、「病的な」現象を発見した。実際、次元を固定して無限個の特異点を考えた際、そのF純閾値達の極限は、一つ低い次元のある特異点のF純閾値としてあらわされるであろうと予想されていたのだが、その予想に対し反例を与えることに成功した。一方で、条件を付け加えることで、予想を正しくすることにも成功した。

## ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Sato K.: “Ascending chain condition for F-pure thresh-

olds on a fixed strongly F-regular germ”, *Compos. Math.*, 155, no.6, 1194--1223(2019)\*

## ●口頭発表 Oral Presentations

Sato. K.: “On accumulation points of F-pure thresholds on regular local rings”, Commutative algebra seminar, University of Michigan, Feb(2020)

Sato K.: “Title:Akizuki-Nakano vanishing on globally F-split 3-folds and its application”, Algebraic geometry seminar, University of Utah, Feb(2020)

Sato K.: “Akizuki-Nakano vanishing on globally F-split 3-folds and its application”, 京都大学代数幾何学セミナー, 京都大学, 1月(2020)

Sato K.: “On the accumulation points of F-pure thresholds”, 第41回可換環論シンポジウム, 倉敷シーサイドホテル, 11月(2019)

Sato K.: “Akizuki-Nakano vanishing on globally F-split 3-folds and its applications”, ファノ多様体及び関連する代数幾何学, 九州大学, 11月(2019)

Sato K.: “F純閾値の昇鎖条件” 日本数学会2019年度秋季総合分科会, 金沢大学, 9月(2019)

Sato K.: “A pathology on the accumulation points of F-pure thresholds”, 東京可換環論セミナー, 東京大学, 7月(2019)

Sato K.: “正標数の特異点”, RIKEN iTHEMSのアウトリーチについての研究集会2019, 玉原国際セミナーハウス, 6月(2019)

Sato K.: “Ascending chain condition for F-pure thresholds”, 第2回大阪高次元代数多様体論, 大阪大学, 5月(2019)

Sato K.: “Introduction to singularity theory in algebraic geometry”, iTHEMS Math Seminar, 理化学研究所, 5月(2019)

## Active matter physics of biological cells and their mechanical control

研究者氏名: 多羅間 充輔 Tarama, Mitsusuke

受入研究室: 生命機能科学研究センター

フィジカルバイオロジー研究チーム

(所属長 柴田 達夫)

アクティブソフトマター物理学の視点から、細胞運動のダイナミクスに関する理論研究を行なっている。生物細胞は、細胞内部でのDNAの転写やタンパク質などの化学反応を、分子モーターを介して力学的な力に変換して様々な運動を示す。そのような細胞のダイナミクスを、力学法則に則って数理モデルを構築することは、未だに簡単なことではない。特に、細胞のように自発的に運動するもの（アクティブマター）は、そのもの自身が自発的に力を生成して運動するが、作用反作用の法則から、その生成する力の単純和はゼロとなる必要がある。そのようなフォースフリーの条件のもとでどのように運動を獲得できるのかは自明ではない。我々のこれまでの研究では、基盤に接着して運動（這行）する細胞は、細胞前部でのアクチン重合による仮足の伸長と後方でのアクトミオシンの収縮という二つの力生成機構を、基盤との接着性の変化（接着の形成と剥離）のダイナミクスに合わせて制御することが重要であることを簡単な力学モデルを構築して明らかにした。また、モデルを発展させて、細胞内部での化学反応と組み合わせることで細胞の這行運動のメカノケミカルモデルを構築した。

このことを踏まえて、本年度は細胞が運動方向にある程度持続することをどのように再現するかを研究した。そのために、細胞の極性をモデルに組み込むことを検討した。まず、細胞に極性があると仮定し、細胞はその極性にある程度依存した方向に異方的に化学反応を起こし、アクチンを重合することで運動すると仮定した。そして、その極性が細胞の運動方向にあるレートで修正を受けると仮定することで、モデルに力学から化学反応へのフィードバックを導入した。化学反応の極性による異方性の度合いと極性の運動方向への変化の度合いを変化することで、細胞の運動持続性を変化することができ、実験結果との比較も行った。

この他、本年度は、新たに以下の2つの課題につ

いて研究を開始した。

まず、アクチンフィラメントとミオシンモーターにより構築されるアクトミオシン皮質の形成過程について理論研究を行った。一般にフィラメント状の物質は境界の付近では回転の自由度が制限され、エントロピックに損をするために、境界付近には集積しにくい。しかし、アクチンフィラメントに結合したミオシンモーターの力生成が十分であれば、枯渇力に打ち勝って皮質構造が出現することを明らかにした。

また、細胞内部における核の成長過程のモデルを構築し、実験結果を再現することに成功した。

## ●口頭発表 Oral Presentations

Mitsusuke Tarama, Kenji Mori and Ryoichi Yamamoto: “Mechanochemical modelling of crawling cells”, 10th International Conference Engineering of Chemical Complexity, Seminaris SeeHotel, Potsdam, Germany, Jun. (2019)

多羅間充輔: “Modeling dynamics around cells”, 第1回研究会「非線形・非平衡系の物理と数理」, 関西学院大学 東京丸の内キャンパス, 8月 (2019)

多羅間充輔, 毛利謙司, 山本量一: “細胞運動のメカノケミカルモデル”, 日本物理学会 2019年秋季大会, 岐阜大学, 9月 (2019)

多羅間充輔: “細胞運動のメカノケミカルモデル”, 研究会「理論と実験」2019, 広島大学 東広島キャンパス, 10月 (2019)

多羅間充輔, 柴田達夫 “アクトミオシン皮質形成の理論研究”, 第9回ソフトマター研究会, 名古屋大学, 11月 (2019)

## ●ポスター発表 Poster Presentations

Mitsusuke Tarama, Kenji Mori and Ryoichi Yamamoto: “Mechanochemical modelling of crawling cells”, 第57回日本生物物理学会年会, シーガイアコンベン



ンションセンター, 宮崎, 9月(2019)  
多羅間充輔, 山本量一: “接着性細胞のメカノケミカ

ルモデル”, 第9回ソフトマター研究会, 名古屋大  
学, 11月(2019)

#### XIV-003

#### 族のゲージ理論の展開と応用

#### Development of gauge theory for families and its applications

研究者氏名: 今野 北斗 Konno, Hokuto  
受入研究室: 数理創造プログラム  
(所属長 初田 哲男)

理論物理のゲージ理論由来の偏微分方程式を滑らかな4次元多様体の上で考察することで、多様体の滑らかさに関する繊細な情報を得るというアイデアは、1980年代初等に Donaldson により導入された。これは前世紀後半のトポロジー・幾何学における最もエポックメイキングな出来事のひとつであり、それ以来続く研究の流れは既に40年近い歴史を持っている。一方、一般に数学において、ある理論があったとき、その族版を考察することは自然な道筋のひとつである。しかしながら、ゲージ理論を4次元多様体の族、すなわちファイバー束に対して適用することは、Ruberman による先駆的な仕事があるものの、その自然さに比してこれまでほとんど顧みられてこなかった。私は数年来、その欠を埋めるべく、族に対するゲージ理論を組織的に展開してきた。今年度はその重要な応用がいくつか収穫できる段階に入った。主たる成果は以下の二つである。

一つ目の成果は、加藤毅・中村信裕両氏との共同研究において、滑らかになれない位相的4次元多様体束を、族に対するゲージ理論を用いて検出できたことである。これは、トポロジーにおける正統的な興味の対象である滑らかになれない位相多様体のファイバー束版というべきものであり、そのようなものが存在することはこれまでは認識すらされていなかったものと思われる。滑らかになれない位相的4次元多様体束の存在は、ファイバーの4次元多様体の微分同相群と同相群にホモトピカルな違いがあることを意味しており、3次元以下ではこのようなことは決して起こらないという事実と比較すると、極めて興味深い。

二つ目の成果は、David Baraglia 氏との共同研究で、最も大切な4次元多様体のひとつである K3 曲面の微分同相群・同相群について重要な知見をいくつか得たことである。まず、K3 曲面の微分同相群

から同相群への包含写像が基本群に誘導する写像が全射でないことを、族のゲージ理論を用いて示した。微分同相群から同相群への包含写像がホモトピー群に誘導する写像が全射でない例は、0次ホモトピー群を除いて4次元では知られておらず、これが初めての例となる。また、上の流れとはやや異なる問題意識に基づくが、Nielsen 実現問題、すなわち写像類群の任意の有限部分群が微分同相群にまで持ち上がるか、という問題に対して、K3 曲面が4次元において初めての反例を与えることを示した。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Hokuto Konno, “Positive scalar curvature and higher-dimensional families of Seiberg-Witten equations”, *Journal of Topology*, 12, no. 4, 1246-1265, (2019).

David Baraglia and Hokuto Konno, “A gluing formula for families Seiberg-Witten invariants”, to appear in *Geometry & Topology*, arXiv:1812.11691.

(その他: プレプリント)

Tsuyoshi Kato, Hokuto Konno, and Nobuhiro Nakamura, “Rigidity of the mod 2 families Seiberg-Witten invariants and topology of families of spin 4-manifolds”, arXiv:1906.02943, submitted

David Baraglia and Hokuto Konno, “A note on the Nielsen realization problem for K3 surfaces”, arXiv:1908.03970, submitted

#### ●口頭発表 Oral Presentations

Hokuto Konno, “The diffeomorphism and homeomorphism groups in dimension 4 and Seiberg-Witten theory”, 千葉大学幾何学セミナー, 千葉大学, 2019年4月9日

Hokuto Konno, “Gauge theory and symmetries of 4-di-

- mensional spaces”, iTHEMS Math Seminar, 理研, 2019年4月26日
- Hokuto Konno, “Characteristic classes defined using 4-dimensional gauge theory”, Johnson homomorphisms and related topics 2019, 東京大学, 2019年5月15日
- Hokuto Konno, “Non-smoothable bundles and gauge theory for families, Geometry”, Topology and Dynamics Seminar, the Okinawa Institute of Science and Technology, 2019年5月23日
- Hokuto Konno, “Difference between the diffeomorphism and homeomorphism groups of 4-manifolds”, Four manifolds: Confluence of high and low dimensions, the Fields Institute, 2019年7月11日
- Hokuto Konno, “The diffeomorphism and homeomorphism groups of 4-manifolds”, Floer Homotopy Theory and Low-Dimensional Topology, University of Oregon, 2019年8月6日
- Hokuto Konno, “How to use K-theory in gauge theory”, Young mathematicians workshop on algebraic, geometric, and analytic aspects of K theory and vector bundles, 琉球大学, 2019年8月23日
- Hokuto Konno, “Rigidity of the mod 2 families Seiberg-Witten invariants”, 日本数学会 2019年度秋季総合分科会, 金沢大学, 2019年9月17日
- Hokuto Konno, “The diffeomorphism and homeomorphism groups of  $K3$ ”, 日本数学会 2019年度秋季総合分科会, 金沢大学, 2019年9月17日
- Hokuto Konno, “Positive scalar curvature and gauge-theoretic constraints on 4-manifolds”, The first Geometry Conference for Friendship of Japan and Germany, 中央大学, 2019年9月23日
- Hokuto Konno, “The diffeomorphism and homeomorphism groups of  $K3$ ”, 4次元トポロジー, 大阪大学, 2019年11月30日
- Hokuto Konno, “The diffeomorphism and homeomorphism groups of  $K3$ ”, 特別セミナー, 慶應義塾大学, 2019年12月3日
- Hokuto Konno, “The diffeomorphism and homeomorphism groups of  $K3$ ”, 4-Dimensional Topology and Gauge Theory, エスカル横浜, 2020年1月28日
- Hokuto Konno, “Gauge theory and the automorphism groups of 4-manifolds”, トポロジカル表面状態, ソリトンとブレン, 指数定理, 大阪大学, 2020年2月18日
- Hokuto Konno, “The diffeomorphism and homeomorphism groups of  $K3$ ”, Branched Coverings, Degenerations, and Related Topics 2020, 徳島大学, 2020年3月9日
- Hokuto Konno, “Gauge theory and diffeomorphism and homeomorphism groups”, 日本数学会 2020年度会 特別講演, 日本大学, 2020年3月17日

**XIV-004                    AdS/CFTで探る量子重力理論の構造と時空生成のメカニズム**  
**Exploring the structure of the quantum gravity and the mechanism**  
**of the spacetime emergence through AdS/CFT correspondence**

研究者氏名: 後藤 郁夏人 Kanato Goto  
 受入研究室: 数理創造プログラム  
 (所属長 初田 哲男)

「AdS/CFTで探る量子重力理論の構造と時空生成のメカニズム」の課題に基づいてAdS時空におけるブラックホールの情報喪失問題に取り組み、量子重力理論における時空の幾何学の役割を研究した。情報喪失問題とは、Hawking放射のエントロピーが増大し続け、ブラックホール内部の情報がHawking放射によって外部に持ち出されることなく蒸発に伴って喪失してしまうという問題である。現在進行中の研究ではあるが、2次元AdS時空上のブラックホ

ールの蒸発過程を量子重力の低エネルギー有効理論に基づいて追っていくと、ある時刻を境に、量子相関の計算に用いるレプリカ多様体という幾何の中にブラックホール内部とHawking放射をつなぐ新たな時空の幾何構造がダイナミカルに生成され、その新たな時空を通してブラックホール内部の情報をHawking放射が共有し、エントロピーの増大を抑えるということが判明した。本年度中には研究の完成には至らなかったが、本研究課題に関わる問題に対

して具体的な理解の進展が望める状況まで研究を進めることができた。今後は蒸発するブラックホールの Hawking 放射のエントロピーを具体的に計算し、量子論のユニタリー性と無矛盾な結果が得られるかを調べることで、およびレプリカ多様体の中にダイナミカルに生成される新たな時空の幾何構造をより詳細に解析し、ブラックホール内部の情報の流れを、低エネルギー重力理論の枠組みの中で時空の幾何として理解することを研究上の第一目標とする。その上でさらに、ストリング理論などの UV 完全な量子重力理論において本問題の低エネルギー重力理論での幾何学的理解を超えた理解を目指し、量子重力理論において時空の幾何が果たす役割の理解を深めたい。また上記の 2次元の研究を我々の住む 4次元時空の中のブラックホールに拡張することも目指したい。

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

Kanato Goto, “Holographic Complexity in the Jackiw-Teitelboim Gravity,” Quantum Information and String Theory 2019, Yukawa Institute for Theoretical Physics(YITP), Kyoto University, Japan, June 2019

Kanato Goto, “Recent developments in the Jackiw-Teitelboim gravity,” Discrete Approaches to the Dynamics of Fields and Space-Time 2019, Shimane University, September 2019 (*Invited*)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

Kanato Goto, “Exploring the Black Hole Interior Through Quantum Computational Complexity,” iTHEMS Advisory Council meeting, Japan 2019

### XIV-005 超精密原子核時計の実現に向けた Th-229m の原子核構造および原子核壊変機構の解明

#### Elucidation of the nuclear structure and the deexcitation process of Th-229m for developing the ultraprecise clock utilizing the nuclear excitation

研究者氏名: 重河 優大 Yudai Shigekawa

受入研究室: 仁科加速器科学研究センター

RI 応用研究開発室核化学研究チーム

(所属長 羽場 宏光)

Th-229 原子核の第一励起準位 (Th-229m) は励起エネルギーが 8.3 eV と非常に小さいため、基底状態から Th-229m へのレーザー励起により超高精密な原子核時計を実現できると期待されている。不確定性原理による Th-229m の線幅の広がりやを考慮すると、励起された Th-229m は半減期の短い内部転換ではなく、半減期の長い  $\gamma$  線放出によって脱励起する必要がある。しかし、Th-229m の励起エネルギー (8.3 eV) が軌道殻電子の結合エネルギー以上だと  $\gamma$  線を放出せず即座に内部転換により脱励起してしまうため、Th-229m 由来の  $\gamma$  線の観測に成功した例はない。本研究では、「① Th-229m をイオン化エネルギーの大きいイオンの状態でイオントラップすること」と、「② Th-229m をバンドギャップの大きい結晶にドープすること」の 2 種類の方法を用いて、Th-229m の内部転換を抑制し、 $\gamma$  線を世界で初めて観測することを目指す。さらに、原子核

時計実現の際の重要なパラメータとなる  $\gamma$  線放出の半減期を決定することを目指す。

①について、本年度は Th-229m イオンを U-233 線源から高い効率で高真空中に引き出すために必要な RF カーペットガスセル装置を開発した。Cs イオン源を用いたテストでは、Cs イオンをガスセル中から高真空中へほぼ 100% の効率で引き出すことに成功した。

②について、Th-229m を CaF<sub>2</sub> などの高バンドギャップ結晶へ適切な化学状態でドープするために、親核の Pa-229 をあらかじめドープするという手法を考案した。加速器で製造された Pa-229 をイオン化して質量分離により精製して結晶へドープするために、理研の研究者が最近開発したイオンインプランテーション装置を用いることにした。本年度は、イオン化された Pa-229 のビーム量を測定するための検出器系を設計・製作した。並行して、Th-229m

の  $\gamma$  線を検出するための高感度・低バックグラウンド光子測定装置を設計・製作した。

①と②に加えて、U-233を用いたTh-229の高励起準位の寿命測定を行い、複数の励起準位について半減期を新しく決定した。Th-229の高励起準位の寿命は、Th-229の原子核構造を解明し、Th-229mの $\gamma$ 線放出の半減期等を予測するために重要である。そのため、本研究課題を達成するための重要な結果を得られたといえる。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Shigekawa Y., Kasamatsu Y., Watanabe E., Ninomiya H., Hayami S., Kondo N., Yasuda Y., Haba H. and Shinohara A.: “Observation of internal-conversion electrons emitted from  $^{229m}\text{Th}$  produced by  $\beta$  decay of  $^{229}\text{Ac}$ ”, Phys. Rev. C 100, 044304 (2019)\*  
Masuda T., Yoshimi A., Fujieda A., Fujimoto H., Haba H., Hara H., Hiraki T., Kaino H., Kasamatsu Y., Kitao S., Konashi K., Miyamoto Y., Okai K., Okubo

S., Sasao N., Seto M., Schumm T., Shigekawa Y., Suzuki K., Stellmer S., Tamasaku K., Uetake S., Watanabe M., Watanabe T., Yasuda Y., Yamaguchi A., Yoda Y., Yokokita T., Yoshimura M. and Yoshimura K.: “X-ray pumping of the  $^{229}\text{Th}$  nuclear clock isomer”, Nature 573, 238 (2019)\*

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

重河優大, 笠松良崇, 渡邊瑛介, 安田勇輝, 近藤成美, 二宮秀美, 速水翔, 羽場宏光, 篠原厚: “Ac-229の $\beta$ 線—電子同時計数測定によるTh-229mの内部転換電子の観測”, 日本放射化学会第63回討論会, いわき, 9月(2019)  
重河優大, 笠松良崇, 山北佳宏, 金子政志, 渡邊雅之, 渡邊瑛介, 安田勇輝, 近藤成美, 篠原厚: “酸化物・フッ化物・塩化物系におけるU-235mの半減期および内部転換電子エネルギースペクトルの測定”, 日本放射化学会第63回討論会, いわき, 9月(2019)

### XIV-006 曲がった時空のカイラル運動論の定式化および渦度が誘発するトポロジカルな現象への応用

#### Formulation of the chiral kinetic theory in curved spacetime and its application to topological phenomena induced by vorticity

研究者氏名: 豆田 和也 Kazuya Mameda  
受入研究室: 仁科加速器科学研究センター  
量子ハドロン物理学研究室  
(所属長 初田 哲男)

初期宇宙の物質はトポロジカルな物性が有するか。これは実は、昨今の大型加速器実験における最重要テーマの1つになっている。量子場の理論に基づけば、クォークは磁場や回転の効果によって、パリティを破るトポロジカルな輸送現象を実現する。この所謂カイラル輸送現象は、トポロジーという系の詳細によらない概念に起因するもので、実際にDirac半金属等の物性系においてもすでに実現されている。こうしたカイラル輸送の研究において、今日必要不可欠な理論ツールとなっているのが、カイラル運動論 (CKT) である。すでにCKTに内在する性質は事細かに明かされているが、一方で時空の幾何による効果は議論されていない。本研究の目的

は、曲がった時空上におけるCKTを第一原理的に導出し、これを用いてあらゆるカイラルフェルミオン系でユニバーサルに実現される新奇輸送現象を探索および解析することである。

本年度は、一般的な時空の曲率、時空の振れ、および温度勾配 (有効的な重力場) が有限のカイラル系における輸送現象を理論的に解析した。

(1) 自身の先行研究において得られている結果に基づき、時空の寄与 (曲率テンソル) の効果を含んだカイラル輸送の基礎方程式を導出した。またこれに付随して、曲がった時空の効果として生じるカイラル粒子特有の輸送現象を導出した。この新規現象に対する現実の物性実験等での観測方法については

現在考案中であり、年度内には論文の完成が見込まれる。

(2) 時空の捩れもスピンと結合する。この結果カイラル捩れ効果という特殊な輸送が発生することが知られているが、その起源、特に量子異常との関連は理解されていない。本研究では運動論的な方法でこれを再導出し、またこの輸送とニーヤン量子異常との関連を調べた。現在は研究結果を論文として執筆中である。

(3) 温度勾配によって誘発される異常輸送現象(異常ネルンスト効果)についても研究を進めている。昨今この現象は精密な観測がなされているが、理論的な解析においては定性的な方法によって重力場の寄与が取り込まれていることが多く、厳密な議論が未だ十分でない。上述の(1)とは異なり、本研究は新たな物理の探索ではなく、既知の現象に対する幾何学的な理解と数学的な正しい記述を目的としている。現在までのところ、代数的な解析はほぼ完了しており、物理的な解釈を明確にすることで、まもなくの論文完成が期待される。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Chen H.-L., Huang X.-G., Mameda K.: “Do charged-pions condense in a magnetic field with rotation?”, arXiv:1910.02700 [nucl-th]

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

Mameda K.: “Chiral kinetic theory in curved space-time”, Quantum kinetic theories in magnetic and vortical fields, Kyoto, Dec.(2019)

Mameda K.: “Chiral kinetic theory in curved space-time”, New development of hydrodynamics and its applications in Heavy-Ion Collisions, Shanghai, Oct. (2019)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

Mameda K.: “Chiral kinetic theory in curved space-time”, XQCD2019, Tokyo, June (2019)

### XIV-007 重元素精密分光のための冷却フランシウム原子源の研究 Study of Cooled Francium Atomic Source Towards High Precision Spectroscopy of Heavy Elements

研究者氏名: 早水 友洋 Hayamizu, Tomohiro  
受入研究室: 仁科加速器科学研究センター  
超重元素研究開発部  
超重元素合成研究チーム  
(所属長 羽場 宏光)

近年、原子・分子の精密分光を行うことで、基本対称性の破れの成分を抽出して、標準模型の検証に用いる試みがなされている。測定対象の例として、CP対称性の破れの検証のための基本粒子のスピンに沿った永久電気双極子モーメント (Electric Dipole Moment, EDM) の探索や、原子内のパリティ非保存 (Parity Non-Conservation, PNC) の探索が挙げられる。これらの探索には、原子内部に強い電場を持ち、相対論効果を利用することでこれらの微小な効果を増幅して抽出可能とされている、原子番号Zの大きな重い原子がよく用いられている。

第7周期に存在するアルカリ原子・フランシウム (Fr, Z=87) は、原子EDM測定値に対する電子

EDMからの増幅度が $10^3$ ほどあり (D. Mukherjee et al.: J. Chem. Phys. A 113, 12549 (2009).)、また、 $^{210}\text{Fr}$ 原子を用いてPNC効果を精密測定することが可能な手法が提案されている (T. Aoki et al.: Appl. Phys. B 123, 120 (2017).)。Frはアルカリ原子であるため、磁気光学トラップによるレーザー冷却・捕獲が既に達成されており (J. E. Simsarian et al.: Phys. Rev. Lett. 76, 3522 (1996).)、極低温まで冷却することで測定環境中での滞在時間を延ばすことができることが利点となっている。一方で、Frは全同位体が半減期最長20分の不安定同位体であり、自然界には実験に使えるほどの量がまとまって存在せず、人工的に生成する必要がある。そこで、

理研、東京大学、東北大学などとの共同研究として、十分な量のフランシウム原子を得てレーザー冷却を行うことを目指し、開発を行った (Y. Sakemi et al.: 14th APPC2019 Conference Proceedings, in print.)。

今年度は、半減期が10日と長いアクチニウム225 ( $^{225}\text{Ac}$ ) を用いて、 $\alpha$ 崩壊した娘核として得られる $^{221}\text{Fr}$ を磁気光学トラップで冷却原子として捕獲するための検討を行った。また、加速器を用いた生成手法として、核子あたり6.5 MeVまで加速した酸素18 ( $^{18}\text{O}$ ) ビームを金標的 ( $^{197}\text{Au}$ ) に入射し、

$^{18}\text{O}+^{197}\text{Au}\rightarrow^{21}\text{XFr} + \text{xn}$ の核融合反応で $^{210}\text{Fr}$ を生成する実験にて、金標的から引き出した $^{210}\text{Fr}$ 由来と推定される崩壊 $\alpha$ 線を半導体検出器にて測定した (小澤直也: 修士論文「フランシウム原子の電気双極子能率探索のための表面電離イオン源の開発」, 東京大学 (2020).)。これに加えて、レーザー冷却に用いるレーザー光源・光学系・および主要な光学除振台を東北大から移送する作業を現在進めている。これらの成果と知見を合わせ、次年度以降でFr原子のレーザー冷却・捕獲の達成を目指す。

#### XIV-008 複素 Langevin 法の一般化による符号問題の回避手法に関する研究 Generalization of the Complex Langevin Method as a Way to Evade the Sign Problem

研究者氏名: 筒井翔一郎 Shoichiro Tsutsui  
受入研究室: 仁科加速器科学研究センター  
量子ハドロン物理学研究室  
(所属長 初田 哲男)

複素 Langevin 法は、モンテカルロ・シミュレーションにおける符号問題を回避する手法のひとつである。複素 Langevin 法は、確率過程を用いたアルゴリズムを用いているにも関わらず Boltzmann weight が複素数値をとるような場合であっても、あたかもこれが確率分布関数であるかのようにして、物理量の期待値を計算することができる。このような手法が正当化される背景には、複素 Boltzmann weight と等価な結果を与える正定値の確率分布関数の存在がある。一方で、複素 Langevin 法が破綻してしまう例も数多く知られており、その適用範囲を拡大させる手法が模索されている。この研究では、複素 Boltzmann weight と等価な正定値の確率分布関数が存在するための条件を明らかにするとともに、そのような確率分布関数を具体的に構成する手法を提案し、符号問題の厳しいモデルの数値計算に応用することを目指す。

今年度は、接触相互作用する2成分フェルミ原子気体に対して、複素 Langevin 法が正当化されるのはどのような場合かを議論するため、Cooper 対凝縮と Gor'kov Green 関数の逆の固有値の関係を一般的な場合について導出した。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

S. Tsutsui, T. M. Doi: “Distribution of solutions of fastest apparent convergence condition in optimized perturbation theory and its relation to anti-Stokes line”, *Ann. Phys.* 409, 167924 (2019)\*.

#### ●口頭発表 Oral Presentations

S. Tsutsui, Y. Ito, H. Matsufuru, J. Nishimura, S. Shimasaki, A. Tsuchiya: “Exploring the QCD phase diagram at finite density by the complex Langevin method on a  $16^3 \times 32$  lattice”. The 37th international conference on lattice field theory (Lattice 2019), Wuhan, 18 June (2019).

S. Tsutsui: “格子QCD”. 理研シンポジウム チュートリアル研究会「高エネルギー重イオン衝突の物理: 基礎・最先端・課題・展望」, 理研和光, 8月20日 (2019).

S. Tsutsui, Y. Ito, H. Matsufuru, J. Nishimura, S. Shimasaki, A. Tsuchiya: “有限密度QCDの複素ランジュバン解析における特異ドリフト問題とディラック演算子の固有値分布”. 日本物理学会秋季大会, 山形大, 9月19日 (2019).

- S. Tsutsui, M. Hongo, T. Sagawa, S. Sato, A. Tsuchiya: “局所熱的純粋状態を用いた流体力学の小さな系への応用”. 日本物理学会秋季大会, 山形大, 9月20日 (2019).
- S. Tsutsui, Y. Ito, H. Matsufuru, Y. Namekawa, J. Nishimura, S. Shimasaki, A. Tsuchiya: “有限密度QCDにおける複素ランジュバン法の適用範囲とカイラル対称性の関係”. シミュレーションによる宇宙の基本法則と進化の解明に向けて (QCUS 2019), 京大基研, 12月17日 (2019).

#### ●ポスター Poster Presentations

- S. Tsutsui, Y. Ito, H. Matsufuru, J. Nishimura, S. Shimasaki, A. Tsuchiya: “Applicability of the complex Langevin method for QCD at finite density”. The 17th International Conference on QCD in Extreme Conditions (XQCD 2019), Tokyo, 24 June (2019).
- S. Tsutsui, T. M. Doi, H. Tajima: “Complex Langevin analysis of Gaudin-Yang model”. 熱場の量子論, 京大基研, 9月2日 (2019).

### XIV-009 セシウムスパッター型負イオン源における分子イオン生成プロセスの研究

#### Study on the production process of molecular ions in negative ion source using Cs sputtering

研究者氏名: 三宅泰斗 Yasuto Miyake  
 受入研究室: 仁科加速器科学研究センター  
 加速器基盤研究部加速器高度化チーム  
 (所属長 奥野 広樹)

セシウム (Cs) スパッター型負イオン源は負イオンビームを用いた科学において幅広く利用されるイオン源である。負イオンの生成は、熱イオン化されたCs<sup>+</sup>イオンを試料表面に照射することにより、スパッタリングで試料から飛び出た原子がCsと相互作用することによるものと考えられている。さらに負イオンの生成には、試料物質の化学形態、電気伝導性、熱伝導性、試料径、試料深さ、カソードの材質、スパッタリング率など様々な要因が関連すると考えられるが、このような試料の状況は経験的に決められているものが多く、まだ解明はされていない面も多い。試料状況から生成される負イオンを予測できれば、負イオンの量を増加させたり生成される負イオンに選択性をもたせることが可能になり、加速器質量分析などの負イオンビームを利用した応用分野に貢献できると期待される。本研究では、その中でも分子負イオンに着目し、セシウムスパッター型負イオン源において分子イオンが生成させるプロセスを解明することを目的とした。

本年度は、実験のためのビームラインのイオン源の改修と整備を中心に行った。Csスパッター型負イオン源であるMCSNICS導入するための真空容器とビームの状態を調べるためのファラデーカップを設計・製作した。また、試料径を変更できるようなカソード及びカソードディスクも製作した。

#### ●誌上发表 Publications

- (原著論文)  
 Miyake Y., Ikoma N., Takahashi K., Sahoo Y. V. and Okuno H.: “Verification test of 107Pd transmutation”, RIKEN Accel. Prog. Rep., 52 79(2019)\*

#### ●口頭発表 Oral Presentations

- (学会)  
 三宅泰斗, 山形武靖, 谷井智樹, 松崎浩之: “MALTにおける加速器質量分析のためのレーザー光脱離システムの開発”, 第80回応用物理学会秋季学術講演会, 札幌, 9月 (2019)

XIV-010

原子核スピン分布制御という新奇手法を用いた  
中性子過剰原子核の構造解明

Structure Study of Neutron-rich Nuclei by New Method Manipulating  
Nuclear Spin

研究者氏名: 西畑 洗希 Hiroki Nishibata  
受入研究室: 仁科加速器科学研究センター  
核分光研究室  
(所属長 上野 秀樹)

本研究の目的は、スピン整列ビームを用いた不安定核ビームとベータ核磁気共鳴（ベータNMR）法を組み合わせた、新たな原子核モーメント測定法の確立及びその際に生成されるスピン偏極を用いた核分光研究により、中性子過剰な原子核の構造解明を行うことである。本研究で提案する手法が確立できれば、理化学研究所のBigRIPSで生成される大強度・高整列度の不安定核ビームと組み合わせ、今まで測定が困難であった安定核から遠く離れた原子核のモーメント測定やスピン偏極核を用いた詳細な核分光研究が可能となる。

まず本年度は研究の第一段階として、スピン整列核を用いてベータNMR法の手法を用いてモーメント測定が可能かということ調べるための開発実験を行った。実験は2019年7月に放射線総合医学研究所HIMACの二次ビームコースSB2を用いて行った。そこでは、核子あたり100 MeVまで加速した

$^{15}\text{N}$ をBe標的に照射し、スピン整列した不安定核 $^{13}\text{B}$ を生成・分離し、ビームライン最下流に配置したベータNMR実験セットアップの中心に配置した $\text{TiO}_2$ 単結晶基板に打ち込んだ。そこに高速断熱通過（AFP）法により周波数掃引を行い、スピン整列の向きに対する0度、180度方向ベータ線の計数率の変化から共鳴周波数を探索した。

その結果、スピン整列原子核からの共鳴を観測することができ、得られた共鳴周波数は既知の $^{13}\text{B}$ のモーメントから予測される値と一致した。これにより、本研究で新たに提案したスピン整列核とベータNMRを組み合わせた手法を実証することができた。加えて、 $^{13}\text{B}$ を用いた実験では、整列度4.5%から最大2.7%のスピン偏極を生成することができた。

以上本研究から、理化学研究所などの大強度ビームを用いてより中性子過剰な原子核の構造解明実験を行う準備ができたと考えている。

XIV-011 三次元コヒーレント共鳴励起を用いたLi様ウランイオンのラムシフト分光  
Lamb Shift Spectroscopy of Lithiumlike Uranium Ion  
Using 3D Resonant Coherent Excitation

研究者氏名: 上野 恭裕 Ueno, Yasuhiro  
受入研究室: 開拓研究本部  
東原子分子物理研究室  
(所属長 東 俊行)

今年度は、GSIでのウランイオンのビームタイムが得られなかったものの、千葉県にある加速器施設Heavy Ion Medical Accelerator in Chiba (HIMAC)を用いたコヒーレント共鳴励起（RCE）実験を行った。実験の前に事前にRCEによる共鳴条件を満たす結晶の角度およびビームエネルギーを数値計算によって決定し、最適な実験条件を決めた。筆者にとってX線領域での分光実験は初であったが、シリコ

ンドリフト検出器（SDD）によるX線測定技術を学び、SDDを安定に運用することができた。HIMACで供給される465MeV/u He様Arイオンビーム・501 MeV/u H様Feイオンビームを用いてSi結晶中でのRCEの観測に成功し、データ解析を行った。これら一連の計算を用いた実験条件の決定、実験装置の運用スキルおよびデータ解析の手法を身につけ、主体的にRCE実験を進めることができる



ようになったことは今後のGSIの実験にもそのまま応用可能であり、本研究課題において重要なステップである。

HIMACの実験では本研究課題の本筋からは少し離れるものの、下記の二つの成果を得た。

1. 結晶中で異なる結晶面からの電場による遷移確率が干渉する様子を観測することができた。X線領域ではコヒーレントな光源が少なく、いわば最先端技術であるX線レーザーを二本重ねて初めて観測できる現象という観点から見ると、興味深い現象であり、このエネルギー領域でそういった現象を見た事例は初めてと言える。この実験結果については年度末の日本物理学会において報告する予定であり、数値計算結果と合わせて来年度論文誌に投稿する予定である。

2. He様Arイオンの二重励起状態2p3pのエネルギーを実験的に求め、RCEは従来の二電子性再結合を用いた手法よりもより精度良くエネルギーを決定する可能性を示した。現在理論家とのコラボレーションによって詳細な実験結果の解釈を進めている。二重励起状態の微細構造は未だ測定されたことがないが、RCEを用いたより分解能の高い分光によってそれが可能であることがわかったため、次年度の

HIMACビームタイムにおいて微細構造の測定を計画している。

またGSIの次期ビームタイムが2020年4月に予定されているため、これに向けてGSIを訪問し準備を進めた。分光のためには結晶の角度を走査する必要があるが、これに必要なゴニオメータ用の整備が必要であった。ゴニオメータ用のモーターに新しいドライバーを接続し、動作試験を行った。従来のRCE実験と異なり、本研究はよりエネルギーの低い軟X線領域(280 eV)の分光のため、これに適した検出器を用意する必要がある。このため、従来実験で用いられてきたSDDの窓を従来のベリリウム製12.5 $\mu$ m厚窓からポリマー製の窓に変えたタイプを用いる予定であり、これについても現在準備を進めている。

#### ●口頭発表 Oral Presentations

上野恭裕, 木村直樹, Kiattichart Chartkunchand, 中井陽一, 中野祐司, 小牧研一郎, 高田栄一, 村上健, 東俊行: “複数の結晶面を用いたコヒーレント共鳴励起における遷移確率の干渉現象”, 名古屋, 3月予定(2020)

### XIV-012 輻射多流体シミュレーションを用いた星・円盤・惑星系形成の研究 Exploring star, protoplanetary disk, and planet system formation with radiation multi-hydrodynamics simulations

研究者氏名: 仲谷 峻平 Ryohei Nakatani

受入研究室: 開拓研究本部

坂井星・惑星系形成研究室

(所属長 坂井 南美)

本研究は、理論・観測の両側面から星や星周円盤、惑星系の形成過程を明らかにすることを目的とする。近年、Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA) など高性能望遠鏡を用いた観測により、星や惑星の形成途中段階にある系の詳細な物理化学構造の理解が進んでいる。特に、円盤系を構成する微粒子がほとんどの系で円環状に分布していることなどが判明し、これまで多くの理論研究で詳細に取り扱われていなかった円盤中微粒子の運動学的・化学的進化が惑星系形成において重要であることが示唆されている。微粒子の運動は必ずしも円盤を

構成するガスの運動とは一致しないため、星・円盤・惑星系進化モデルの構築には多成分の構成要素(i.e. ガスと微粒子)の進化を独立に扱った計算が必要となる。その中で、我々は初めての輻射多流体シミュレーションを用いた星・惑星系形成の研究により、次世代高性能望遠鏡を用いた観測と詳細な比較が可能なモデルを構築する。

本年度は、L1527と呼ばれる系に存在する原始星周円盤のALMA観測データを解析し、L1527の円盤が円環状の微粒子分布を持つことを明らかにした。L1527はこれまで微粒子の円環構造が見つかつ

ている系の中で最も若いため、我々の研究は微粒子の円環構造が星・惑星形成のごく初期の段階で存在していることを世界で初めて明らかにした。本研究結果は、微粒子の円環構造形成タイムスケールを決めるため、これまで多く提案されている円環形成モデルに対して強い制限を与える。これは円環の形成過程を解明において重要となる。また、微粒子の円環は円盤中の惑星形成と直接的な関係を持つと考えられているため、本研究結果は惑星形成に対しても多くの示唆を与える。

本年度は上の研究に加え、輻射多流体コードの開発にも取り組んだ。多流体シミュレーションの世界の第一人者である Hui Li 氏や Min-Kai Lin 氏との議論を通して、必要な計算モジュールや計算資源量の内容を具体的に明らかにした。それらの計算モジュールを自身が開発した輻射流体コードに実装した後、テストを行っている。来年度には、本コードを用いて L1527 系におけるガスと微粒子の物理的構造をモデル化し、観測結果と比較することで L1527 系の未知プロパティ（主星光度や質量、円盤質量、ガスと微粒子の相対的な空間分布など）を導く研究にも取り組む。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Nakatani R. and Yoshida N. “Photoevaporation of Molecular Gas Clumps Illuminated by External Massive Stars: Clump Lifetimes and Metallicity Dependence”, the *Astrophysical Journal*, 883 127 (2019)\*

Nakatani R., Liu B. H., Ohashi S., Zhang Y., Hanawa T., Chandler C., Oya Y. and Sakai N. “Substructure Formation in a Protostellar Disk of L1527 IRS”, the *Astrophysical Journal Letters*, 895, L2\*

#### ●口頭発表 Oral Presentations

Nakatani R., “Radiation Hydrodynamics Simulations

of Photoevaporating Protoplanetary Disks with Various Metallicities”, r-EMU 1<sup>st</sup> symposium, RIKEN, Wako-shi, Saitama, Japan, Aug. (2019)

Nakatani R. Yoshida N., “大質量星近傍分子雲コアの紫外線光蒸発：輻射駆動爆縮とコア寿命の金属量依存性”，天文学会秋季年会，熊本大学 黒髪キャンパス，熊本，9月（2019）

Nakatani R., Hosokawa T., Yoshida N., Nomura H. and Kuiper R., “Radiation Hydrodynamics Simulations of Photoevaporating Protoplanetary Disks: Implications to Metallicity Dependence of Disk Lifetimes”, Subaru Telescope 20<sup>th</sup>-anniversary, Hawaii, USA, Nov. (2019)

Nakatani R., Hosokawa T., Yoshida N., Nomura H. and Kuiper R., “Photoevaporation of Protoplanetary Disks: Metallicity Dependence and Lifetimes”, NAOJ Planet Formation Workshop, Tokyo, Japan, Nov. (2019)

Nakatani R., Liu B. H., Ohashi S., Zhang Y., Hanawa T., Chandler C., Oya Y. and Sakai N. “Substructure Formation in a Protostellar Disk around a Class 0 Protostar”, Workshop for Protoplanetary Disks and Exoplanets, ASIAA, Taiwan, Dec. (2019)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

Nakatani R., Hosokawa T., Yoshida N., Nomura H. and Kuiper R., “Radiation Hydrodynamics Simulations of Photoevaporating Protoplanetary Disks with Various Metallicities”, In the spirit of Lyot, Tokyo, Japan, Oct. (2019)

Nakatani R., Hosokawa T., Yoshida N., Nomura H. and Kuiper R., “Radiation Hydrodynamics Simulations of Photoevaporating Protoplanetary Disks: Metallicity Dependence”, ResCEU Symposium, Okinawa, Japan, Oct. (2019)

One-dimensional electron systems with strong spin-orbit interaction  
and the superconducting junctions

研究者氏名: 松尾 貞茂 Matsuo Sadashige  
受入研究室: 創発物性科学研究センター  
量子機能デバイス研究グループ  
(所属長 樽茶 清悟)

電子間相互作用を有する1次元電子系はフェルミ液体ではなく朝永ラッティンジャー液体 (TLL) と呼ばれる状態となることが知られている。TLLは電子系のみならず相関を持つ1次元電子系に対して普遍的に適用可能な描像を与えるものであるため、その特性の理解は重要な意義を持つ。近年、物質中でスピン軌道相互作用を用いたスピン操作の物理の理解とその技術が進展している。しかし、TLLの物性が強いスピン軌道相互作用によってどのように変化するかを系統的に解明した研究は存在しない。

本研究計画では、強いスピン軌道相互作用を有するInAs量子細線でのTLLの振る舞いを実験的に検出することで、強いスピン軌道相互作用を持つTLLの特性を解明することを目指す。スピン軌道相互作用がTLLにおいて重要であるのかどうかを理解することで、今後のTLLに関する物理、スピン軌道相互作用に関する物理へ貢献する。

さらに、強い電子間相互作用を有するTLL二本と超伝導体の接合において、超伝導体中のクーパー対を形成する2個の電子が二本のTLLへと分離するクーパー対分離現象の検出を行い、この系で理論的に提案されている無磁場でのマヨラナ粒子の実証を行う。超伝導体と半導体ナノ細線の接合を用いたマヨラナ粒子の実証実験では、これまで単一のナノ細線の超伝導接合が用いられてきたが、この場合外部磁場の印加が必須となる。しかし、この外部磁場は超伝導性を損ない、準粒子励起によるマヨラナ粒子のトポロジカル保護への悪影響などが指摘されている。二重ナノ細線の超伝導接合では、クーパー対分離と呼ばれる非局所超伝導効果が期待されるが、この分離のエネルギーが局所効果のエネルギーを上回することで二重ナノ細線の端にマヨラナ粒子が無磁場においても出現する。マヨラナ粒子の実証には、シャピロ階段の測定を予定している。この系を用い

ることで、現在までに実験的に検証されてきた磁場印加による超伝導体/量子細線接合にとって代わる新たな無磁場でのマヨラナ粒子の実験舞台を創出する。

●誌上発表 Publications

(原著論文)

1. Kento Ueda, Sadashige Matsuo, Hiroshi Kamata, Shoji Baba, Yosuke Sato, Yusuke Takeshige, Kan Li, Soren Jeppesen, Lars Samuelson, Hongqi Xu, Seigo Tarucha, “Dominant non-local superconducting proximity effect due to electron-electron interaction in a ballistic double nanowire”, *Science Advances* 5, eaaw2194 (2019)
2. Chen-Hsuan Hsu, Peter Stano, Yosuke Sato, Sadashige Matsuo, Seigo Tarucha, Daniel Loss, “Charge transport of a spin-orbit-coupled Tomonaga-Luttinger liquid”, *Phys. Rev. B* 100, 195423 (2019)
3. Yosuke Sato, Sadashige Matsuo, Chen-Hsuan Hsu, Peter Stano, Kento Ueda, Yuusuke Takeshige, Hiroshi Kamata, Joon Sue Lee, Borzoyeh Shojaei, Kaushini Wickramasinghe, Javad Shabani, Chris Palmström, Yasuhiro Tokura, Daniel Loss, Seigo Tarucha, “Strong electron-electron interactions of a Tomonaga-Luttinger liquid observed in InAs quantum wires”, *Phys. Rev. B* 99, 155304 (2019)

●口頭発表 Oral Presentations

1. K. Kuroyama, S. Matsuo, S. R. Valentin, A. Ludwig, A. D. Wieck, Y. Tokura and S. Tarucha, “Real-time observation of spin-flip tunneling processes driven by a nearby phonon source” *International Symposium on Hybrid Quantum Systems 2019 (HQS2019)*, Matsue, Shimane, Dec. 2, 2019

2. Kento Ueda, Sadashige Matsuo, Hiroshi Kamata, Yosuke Sato, Yusuke Takeshige, K. Li, Soren Jeppesen, Lars Samuelson, Hongqi Xu, and Seigo Tarucha, “Anomalous Shapiro steps in Josephson junctions of ballistic InAs nanowires” International Symposium on Hybrid Quantum Systems 2019 (HQS2019), Matsue, Shimane, Dec. 2, 2019
  3. (Invited) Sadashige Matsuo “Experimental study on superconducting junctions of a double InAs nanowire” The Future of Topological Materials, Jadwin Hall, Princeton University, USA, October 2-5, 2019
  4. S. Matsuo, K. Kuroyama, S. Yabunaka, J. Muramoto, S. R. Valentin, A. Ludwig, A. D. Wieck, and S. Tarucha, “Experimental study on full counting statistics of the Pauli spin blockade effect” Quantum Designer Physics 2019, San Sebastian, Spain, July 2, 2019
  5. S. Matsuo, K. Kuroyama, J. Muramoto, S. R. Valentin, A. Ludwig, A. D. Wieck, Y. Tokura and S. Tarucha, “Breakdown of Pauli spin blockade by phonon irradiation in a GaAs double quantum dot” Compound Semiconductor Week 2019, Nara, Japan, May 22, 2019
  6. Kento Ueda, Sadashige Matsuo, Hiroshi Kamata, Yosuke Sato, Yusuke Takeshige, K. Li, Soren Jeppesen, Lars Samuelson, Hongqi Xu, and Seigo Tarucha, “Observation of dominant non-local superconducting proximity effect due to electronelectron interaction in a ballistic double nanowire” Compound Semiconductor Week 2019, Nara, Japan, May 22, 2019
  7. Yuusuke Takeshige, Sadashige Matsuo, Russell Stewart Deacon, Kento Ueda, Yosuke Sato, Yi-Fan Zhao, Ling Zhang, Cui-Zu Chang, Koji Ishibashi, and Seigo Tarucha, “Observation of a.c. Josephson effect in gate tunable Josephson junction on topological insulator (Bi<sub>0.2</sub>Sb<sub>0.8</sub>)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> films” Compound Semiconductor Week 2019, Nara, Japan, May 22, 2019
  8. (Invited) 松尾貞茂, “半導体ナノ細線の超伝導接合を用いたマヨラナ粒子実証の試み” マヨラナ励起の実証に向けて, 東京工業大学 2019/11/14-15
  9. 松尾貞茂, 黒山和幸, 藪中俊介, Sascha R. Valentin, Arne Ludwig, Andreas D. Wieck, 樽茶清悟 “GaAs二重量子ドットにおけるパウリスピン閉塞効果の完全計数統計” 日本物理学会2019年秋季大会, 岐阜大学, 2019/9/11
  10. 上田健人, 松尾貞茂, 鎌田大, 佐藤洋介, 武重有祐, K. Li, S. Jeppesen, L. Samuelson, H. Q. Xu, 樽茶清悟 “InAs ナノ細線ジョセフソン接合におけるシャピロステップのゲート依存性” 日本物理学会2019年秋季大会 岐阜大学 2019年9月11日
- ポスター発表 Poster Presentations
11. Y. Takeshige, S. Matsuo, Russell S. Deacon, Kento Ueda, Yosuke Sato, Yi-Fan Zhao, Ling Zhang, Cui-Zu Chang, Koji Ishibashi, Seigo Tarucha, “Experimental study of gate tunable Josephson junctions on topological insulator (Bi<sub>0.8</sub>Sb<sub>0.2</sub>)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>” Quantum Designer Physics 2019, San Sebastian, Spain, July 2, 2019
  12. Yosuke Sato, Sadashige Matsuo, Chen-Hsuan Hsu, Peter Stano, Daniel Loss, Kento Ueda, Yuusuke Takeshige, Hiroshi Kamata, Joon Sue Lee, Borzoyeh Shojaei, Javad Shabani, Christopher Palmstrom, Yasuhiro Tokura, Seigo Tarucha, “Strong electron-electron interactions of a Tomonaga-Luttinger liquid observed in wires formed on InAs quantum well”, New materials and structures in topological and correlated systems (Gordon research conference), Hong Kong, June 16- 21, 2019
  13. Kento Ueda, Sadashige Matsuo, Hiroshi Kamata, Yosuke Sato, Yusuke Takeshige, Kan Li, Soren Jeppesen, Lars Samuelson, Hong-qing Xu, Seigo Tarucha, “Cooper pair splitting in a ballistic Josephson junction of InAs double nanowire” New materials and structures in topological and correlated systems (Gordon research conference), Hong Kong, June 16- 21, 2019

Development of four-body non-adiabatic multi-channel reaction calculation  
method and its application to cold antihydrogen atom reactions

研究者氏名: 山下 琢磨 Yamashita, Takuma  
 受入研究室: 仁科加速器科学研究センター  
 ストレンジネス核物理研究室  
 (所属長 肥山 詠美子)

四粒子系の量子力学的散乱問題は、構造体同士の散乱の最も基礎的な側面を扱う点で、三粒子系の散乱問題と質的に大きく異なる。例えば、原子同士の衝突過程の雛形は、水素様原子同士の散乱過程であり、二核・二電子の系である。本研究では、四粒子系の定常的な散乱状態を厳密に評価できる計算法の開発を目指す。特に、組替反応過程を含む複数の非弾性散乱チャンネルが開いている散乱状態の全波動関数の構築は一つの大きな課題である。本研究では、散乱の中間状態を、全ハミルトニアンを対角化する基底関数で展開することでこの問題を解決する。粒子間相互作用に依存せず適用可能な四粒子多チャンネル反応計算法を確立し、原子物理学・核物理学の基本的な問題に応用する。

本研究の一つの応用が、低速反水素原子反応過程である。反水素原子は、陽電子と反陽子の束縛状態である。水素原子同士の衝突においては、多チャンネルの散乱問題は高いエネルギーでの衝突において現れるが、反水素原子と水素原子の散乱では、反陽子と原子核のクーロン引力による結合のために、どんなに低速衝突であっても、無限個の非弾性散乱チャンネルが現れる。これは、一般に物質・反物質が混ざり合った時の基本的な側面であるが、低エネルギーであるために有効な近似法がなく、定量的な理解はほとんど未開拓である。

本年度は、電子と陽電子の束縛状態であるポジトロニウムと反水素原子の衝突過程を雛形として、開発したコードの実践的な応用を行った。この反応は、反水素正イオン（二つの陽電子と一つの反陽子からなる系）を生成する過程として、弱い等価原理検証実験を目的とする素粒子実験の観点からも注目が集まっていた。反応断面積の正確な算出には、ポジトロニウムの脱励起過程（6-10チャンネル）と、組替反応である反水素正イオンの生成過程を同時に解く必要があった。本年度の研究により、以下の成果が

得られた。

- (1) 10チャンネル以上の四粒子多チャンネル反応を解くことができるようになった。確率の流れの保存則および詳細釣り合いの原理を定量的な断面積の評価に十分な精度で満たしていることが確認できた。
- (2) 第二励起ポジトロニウムと反水素原子の低速散乱において、反水素正イオン生成過程が、速いポジトロニウムの脱励起過程と脱分極過程と競合することが明らかになった。
- (3) 部分断面積を解析することで、共鳴状態の崩壊過程が分析できるようになった。

## ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Piotr Froelich, Takuma Yamashita, Yasushi Kino, Svante Jonsell, Emiko Hiyama, Konrad Piszczatowski: “Four-body treatment of the antihydrogen-positronium system: binding, structure, resonant states and collisions”, *Hyperfine Interactions* 240, 46 (16pp), 2019.\*

Takuma Yamashita, Yasushi Kino, Emiko Hiyama, Konrad Piszczatowski, Svante Jonsell, Piotr Froelich: “Towards prediction of the rates of antihydrogen positive ion production in antihydrogen-excited positronium reaction”, *Journal of Physics: Conference Proceedings*, 1412, 052012 (2020).\*

## ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

Takuma Yamashita, Yasushi Kino, Emiko Hiyama, Konrad Piszczatowski, Svante Jonsell, Piotr Froelich: “Towards prediction of the rates of antihydrogen positive ion production in antihydrogen-excited positronium reaction”, XXXIst International Confer-

ence on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions, Deauville, France, Jul. (2019).

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

Takuma Yamashita, Yasushi Kino, Emiko Hiyama, Svante Jonsell, Piotr Froelich: “Inelastic resonant scattering of positronium by (anti)hydrogen atom”, XX International Workshop on Low-Energy Positron and Positronium Physics & XXI International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, Belgrade, Serbia, Jul. (2019).

Motoaki Niiyama, Takuma Yamashita, Yasushi Kino: “Four-body calculation of energy levels of muonic molecule  $d\mu e$  in muon catalyzed fusion”, XXXIst International Conference on Photonic, Electronic,

and Atomic Collisions, Deauville, France, Jul. (2019).

Takuma Yamashita, Muhammad Umair, Yasushi Kino, Emiko Hiyama: “Coupled rearrangement channel calculation of dipole resonance states of positronic helium atom”, XXXIst International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions, Deauville, France, Jul. (2019).

Takuma Yamashita, Yasushi Kino, Emiko Hiyama, Konrad Piszczatowski, Svante Jonsell, Piotr Froelich: “Towards prediction of the rates of antihydrogen positive ion production in antihydrogen-excited positronium reaction”, XXXIst International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions, Deauville, France, Jul. (2019).

### XIV-015 Nanoscopic Visualization of Non-equilibrium Electron Kinetics via Terahertz Fluctuation in Matters

Name: Qianchun WENG

Host Laboratory: Surface and Interface Science Laboratory  
RIKEN Cluster for Pioneering Research  
Laboratory Head: Yousoo KIM

In this study, a conceptually new scanning probe technique (called scanning noise microscope, SNoiM) is developed for studying the charge-carrier dynamics and the associated energy dissipation process down to the atomic scale. The SNoiM to be developed is a combination of ultrahigh vacuum (UHV), low temperature scanning tunneling microscope (LT STM) with a homemade ultrasensitive terahertz detector (called charge sensitive infrared phototransistor, CSIP). First, the CSIP detector is fabricated using the electron beam lithography (EBL) and successfully transferred into the low temperature (4.5 K) STM chamber. It has been tested that CSIP detector can be properly operated in the existing STM system and it shows sensitive photo-response to the incident radiations from room temperature objects (when the low temperature window is open, 300 K thermal radiation can directly enter the STM chamber and detected by CSIP). The STM chamber should be completely dark when both 77 K win-

dow and 4.5 K window are closed. However, with the sensitive CSIP detector, an unexpected background radiation is measured (the effective radiation temperature,  $T_{\text{rad}}$ , is roughly estimated to be around 80 K). The background radiation should be significantly suppressed in the future SNoiM measurements because the THz signal from the sample will be much smaller. As for the next step, THz optics is designed and combined with the new CSIP detector. The focus of the lens systems should be accurately align to the photo-sensitive area ( $130 \times 130 \mu\text{m}^2$ ) of the CSIP detector. The new CSIP detector together with the lens systems are then incorporated into the LT STM system.

#### ●Oral Presentations

Conferences

Weng Q., An Z., Lu W. and Komiyama S.: “Nanoscopy of charge kinetics via terahertz fluctuation” 25<sup>th</sup> International Conference on Noise and Fluctuations,



P. and Lake B.: Anisotropic exchange Hamiltonian, magnetic phase diagram and domain inversion of  $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ , Phys. Rev. B 99, 144420 (2019)

Conferences

Benton O.: Quantum spin liquids in dipolar-octupolar pyrochlores, Strongly Correlated Electron Systems 2019, Okayama, Japan, September (2019)

## ●Oral Presentations

XIV-017

### 超伝導回路上で実現する開放量子系の制御と測定

#### Control and measurement of open quantum systems realized in superconducting circuits

研究者氏名: 河野 信吾 Kono, Shingo  
受入研究室: 創発物性科学研究センター  
超伝導量子エレクトロニクス研究チーム  
(所属長 中村 泰信)

近年、大規模量子計算に向けた超伝導回路の集積化の研究が急速に推し進められている。ここでは、「量子系をいかに高精度に制御・測定するか」という学術的な研究領域を超えて、「制御・測定可能な量子系をいかに集積するか」という工学的な側面が強まっている。現状では、複雑化するマイクロ波配線やクロストークの問題により、個々の性能を保ったまま量子ビット数を拡張することが困難な状況にある。本研究では、「超伝導量子ビットと伝搬マイクロ波の相互作用」という物理的な側面に着目し、超伝導量子ビットに対するより高精度な制御・測定手法の開発を目指す。

本年度は、ジョセフソン量子フィルタ（以下、JQF）の開発について取り組んだ。超伝導量子ビットは、制御線を介してマイクロ波を照射することによりRabi振動を誘起し、制御することが可能である。超伝導量子ビットを高速に制御するためには、超伝導量子ビットを制御線と強く結合させる必要がある。その結合は、より大きな輻射緩和を引き起こし、超伝導量子ビットの緩和時間を低下させてしまう。逆にその結合を弱くすると、緩和時間が伸びる一方で制御の速度が遅くなってしまう。つまり、超伝導量子ビットの長いコヒーレンス時間と高速な制御の間にはトレードオフ関係が存在する。このトレードオフ関係を解消するために、補助的な超伝導量子ビットであるJQFを制御線に強く結合させることを考えた。JQFは、制御対象の超伝導量子ビットから制御線に緩和されたマイクロ波光子を反射することにより、輻射緩和を抑制することができる。一方、多光子

を含む制御マイクロ波は、JQFを飽和させ透過することができるため、超伝導量子ビットを高速に制御することができる。我々は、理論的および実験的な側面において、JQFが超伝導量子ビットの制御に関するトレードオフ関係を解消できることを実証した。

## ●誌上发表 Publications

- J. Joo, C.-W Lee, S. Kono, and J. Kim: “Logical measurement-based quantum computation in circuit-QED”, Scientific Reports, 9, 16592 (2019).
- J. Ilves, S. Kono, Y. Sunada, S. Yamazaki, M. Kim, K. Koshino, and Y. Nakamura, On-demand generation and characterization of a microwave time-bin qubit, npj Quantum Information 6, 34 (2020).
- D. Lachance-Quirion, S. P. Wolski, Y. Tabuchi, S. Kono, K. Usami, and Y. Nakamura, Entanglement-based single-shot detection of a single magnon with a superconducting qubit, Science 367, 425-428 (2020).
- K. Koshino, S. Kono, and Y. Nakamura, Protection of a qubit with a subradiance effect: Josephson quantum filter, Phys. Rev. Appl. 13, 014051 (2019).
- S. Kono, K. Koshino, D. Lachance-Quirion, A. F. van Loo, Y. Tabuchi, A. Noguchi, and Y. Nakamura, Breaking the trade-off between fast gate and long lifetime of a superconducting qubit, Nature Commun. 11, 3683 (2020).



## ●口頭発表 Oral Presentations

(国際会議)

- S. Kono: “Quantum measurement of itinerant microwave photons using superconducting circuits”, International Workshop on Solid-State Qubits, Daejeon, Korea (2019), invited.
- S. Kono: “Generation and detection of itinerant microwave photons using superconducting qubits”, The 5th International Symposium on Microwave/Terahertz Science and Applications, Busan, Korea (2019), invited.
- S. Kono: “Generation and detection of itinerant microwave photons using superconducting qubits”, AQL Young Scientist Workshop, Hangzhou, China (2019), invited.
- S. Kono, K. Koshino, J. Ilves, Y. Sunada, Y. Tabuchi, A. Noguchi, Y. Nakamura: “Generation and detection of itinerant microwave photons using a superconducting qubit”, 32nd International Symposium on Superconductivity (ISS2019), Kyoto, Japan (2019), invited.

## ●ポスター発表 Poster Presentations

(国際会議)

- S. Kono, K. Koshino, Y. Tabuchi, A. Noguchi, D. Lachance-Quirion, and Y. Nakamura, Breaking the trade-off between gate and relaxation times of a superconducting qubit with a Josephson quantum filter: Experiment, SQ20th, Tsukuba, Japan (2019).
- S. Kono, K. Koshino, D. Lachance-Quirion, Y. Tabuchi, A. Noguchi, and Y. Nakamura, Breaking the trade-off between gate and relaxation times of a superconducting qubit, Topical Conference on Quantum Computing 2019 (TCQC2019), Kyoto, Japan (2019).

(国内会議)

- 河野信吾, 越野和樹, 田渕豊, 野口篤史, D. Lachance-Quirion, 中村泰信, Josephson量子フィルタを用いた超伝導量子ビットにおける制御時間と緩和時間のトレードオフ関係の解消, 第40回量子情報技術研究会, 九州大学, 福岡 (2019).

## XIV-018 クロマチン構造転移の生物物理：細胞分化現象のミクロ理解に向けて

### Biophysics of chromatin remodeling: toward microscopic understanding of cell differentiation

研究者氏名: 深井 洋佑 Yohsuke Fukai  
受入研究室: 生命機能科学研究センター  
生体非平衡物理学理研白眉研究チーム  
(所属長 川口 喬吾)

ヒストンの化学的修飾によるヌクレオソーム相互作用の変化に伴って起こるクロマチン構造変化について理解することは、細胞分化の離散性・頑健性の起源について考察する上で重要であると考えられる。この問題に取り組むため、ヒストン修飾を制御したクロマチン再構成実験系の構築・クロマチン状態と細胞分化運命との相関の研究というボトムアップ・トップダウンの両面からの研究を進めている。

クロマチン再構成実験では、ヒストンにDNA鎖を巻きつけた後にライゲーションすることで、ヒストン修飾パターンをコントロールした長い(96-mer)クロマチン鎖を再構成し、クロマチン構造を制御すると考えられているタンパク質の濃度変化に

よる構造変化を観察することを目指している。これにより、外部溶液の条件がヒストン修飾パターンを通してどのようにクロマチンの構造と結びついていくか、物理モデルと比較した理解につなげたいと考えている。本年度は、目的とする12-merヌクレオソーム再構成用のDNAを8種類精製し、計画通りの連結をすることを確認した。また、2つの12-merクロマチンを再構成した後に連結することを確認した。また、観察系について考察を行い、クロマチンの蛍光ラベリングならびに全反射照明蛍光顕微鏡での観察の技術検証を行った。来年度には目的とする12-merのヌクレオソームを8種類再構築しライゲーションできる系を構築して、産物の全反射照明蛍

光顕微鏡・電子顕微鏡・AFM等などでの観察を目指す。

クロマチン状態と細胞分化運命との相関については、分化条件・観察条件を決定するための予備実験を行っている。来年度は、この系を用いて分裂した娘細胞の片方の核内構造 (scRepli-seqなどを用いて調べることを予定している) と、もう一方の分化運命を調べ、その相関について議論したいと考える。

加えて、進めていた界面成長過程に関する論文を執筆し、投稿した (出版予定)。加えて、上皮細胞集団の挙動にヒントを得た分裂する粒子によって形成される界面についての研究を進め、国際会議 STATPHYS 27をはじめとするいくつかの発表を行った。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Yohsuke T. Fukai and Kazumasa A. Takeuchi, Phys. Rev. Lett. 124, 060601 (2020)

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

Fukai T. Yohsuke, Tamai Keiichi, Yamaguchi Hiroki and Hiraiwa Tetsuya: “Universal interface fluctuations for absorbing-state phase transitions”, STATPHYS 27, Buenos Aires, Argentina, Jul.(2019)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

Yohsuke T. Fukai: “Interface formed by duplicating particles (+ $\alpha$ )”, BDR Retreat 2019, 淡路, 10月 (2019)

深井洋佑: “クロマチン構造転移の理解に向けた再構成実験系 (+ $\alpha$ )”, 新学術領域 情報物理学でひもとく生命の秩序と設計原理 第1回領域会議, 沼津, 10月 (2019)

深井洋佑, 玉井敬一, 山口裕樹, 平岩徹也: “分裂する粒子のつくる界面ゆらぎ”, 遺伝子制御の基盤となるクロマチンポテンシャル 第1回ワークショップ, 蒲郡, 6月 (2019)

深井洋佑, 玉井敬一, 山口裕樹, 平岩徹也: “分裂する粒子のつくる界面ゆらぎ”, 2019年度生物の3D形態を構築するロジック班会議, 札幌, 6月 (2019)

XIV-019

### Rare-Earth-Catalyzed Regio- and Enantioselective C-H Bond Functionalization

Name: Xuefeng CONG

Host Laboratory: Advanced Catalysis Research Group

RIKEN Center for Sustainable Resource Science

Laboratory Head: Zhaomin HOU

The development of catalytic diastereodivergent transformations for the synthesis of all possible diastereoisomers of functionalized 1-aminoindanes from the same set of starting materials is of great interest and importance. In present research, we have achieved for the first time the diastereodivergent [3+2] annulation of aldimines with alkenes via *ortho*-C-H activation by using half-sandwich rare-earth catalysts having different steric environments around the central metal atom. The  $C_5Me_4SiMe_3$ -ligated Sc-1 with more hindered scandium center gave *trans* diastereoisomers of 1-aminoindanes, whereas the larger yttrium complex Y-3 bearing less sterically hindered *tetra*-methyl cyclopentadienyl

ligand afforded *cis* selective diastereoisomers. A variety of substituted styrenes containing either electron-withdrawing or -donating substituents all reacted with aldimine in the presence of Sc-1 or Y-3, exclusively affording the corresponding *trans*- or *cis*-selective products in good yield and high diastereoselectivity. A range of aromatic aldimines bearing electron-donating and -withdrawing groups could smoothly react with styrene, affording the corresponding products *trans* or *cis* isomers in good yield with high diastereoselectivity (> 19:1 d.r.). Generally, a range of functional groups, including halogen, trimethylsilyl, dimethylamino, and even terminal alkenyl were well tolerated, thus

affording more opportunities for further chemical transformations. The diastereodivergent annulation reaction can be performed on a gram scale without detriment to its efficiency, which afforded respective *trans* and *cis* products in good yield and excellent d.r. The intramolecular kinetic isotope effect (KIE) of the Sc-1 catalyzed annulation was found to be  $k_H/k_D = 1.1$ . The intermolecular KIE of  $k_H/k_D = 1.5$  was investigated by means of the initial rates of the two side-by-side reactions of substrates 1a and 1a-*d*<sub>5</sub>. In sharp contrast, the intramolecular KIE of  $k_H/k_D = 3.0$  and the intermolecular KIE of  $k_H/k_D = 6.7$  were observed for Y-3 catalyzed annulation. These results suggest that the *ortho*-C-H cleavage of the aldimine may be involved in the rate-determining step of Y-3 catalyzed annulation, but is not involved in the rate-determining step of Sc-1 catalyzed annulation. We suggest that the interaction of the weakly coordinating arene  $\pi$  system and the electrophilic yttrium center is crucial to leading to the exclusive *cis* diastereoselectivity. The catalytic system features excellent substrate scopes and functional group compatibility and high regio- and diastereoselectivity. In addition, we have achieved for the first time the scandium-catalyzed regio- and diastereoselective [3+2] annulation of aldimines with alkenes via sp<sup>3</sup> C-H activation. This process constitutes an efficient route for the synthesis of *trans* selective functionalized cyclo-

pentylamines from easily accessible starting materials. This reaction features a broad substrate scope, high yields, and high diastereoselectivity.

#### ●Oral Presentations

##### Conferences

Cong X., Nishiura, M. and Hou Z.: "Rare-Earth-Catalyzed Diastereodivergent [3+2] Annulation of Aldimines with Alkenes via C-H Activation" The 35th Conference of Rare Earth Society of Japan, Osaka University, Osaka, Japan 2019, May 15-16.

Cong X., Nishiura, M. and Hou Z.: "Rare-Earth-Catalyzed Diastereodivergent [3+2] Annulation of Aldimines with Alkenes via C-H Activation" The 69th Conference of Japan Society of Coordination Chemistry, Nagoya University, Nagoya, Japan 2019, September 21-23.

#### ●Poster Presentations

##### Conferences

Cong X., Nishiura, M. and Hou Z.: "Rare-Earth-Catalyzed Diastereodivergent [3+2] Annulation of Aldimines with Alkenes via C-H Activation" The 1st International Symposium on Hybrid Catalysis for Enabling Molecular Synthesis on Demand, The University of Tokyo, Tokyo, Japan 2019, May 30-31.

## XIV-020 In-situ 分光電気化学情報の統計処理による多電子移動反応論の開拓

### Development of Multi-Electron Transfer Theory Based on In-situ Spectroelectrochemistry and Machine Learning

研究者氏名: 大岡 英史 Hideshi Ooka  
受入研究室: 環境資源科学研究センター  
生体機能触媒研究チーム  
(所属長 中村 龍平)

本研究の目的は、効率的な電極触媒を開発するための理論的構築である。このことを通して、水の電気分解による水素製造など、持続可能な社会の中樞を担うエネルギー変換技術の開発に貢献することを目指す。

現在の電極触媒の開発は、100年以上前に提唱された経験則 (Sabatier 則) に基づいて行われている。

この法則は、「触媒と基質の間に作られる化学結合の強さを最適化することで、触媒活性が向上する」ことを述べている。しかし、この法則は多段階の触媒反応のごく一部にしか着目していない。また、反応がほとんど起こらない平衡状態近傍の活性の予測を得意とする一方、実際に触媒が使われるような、平衡から離れた環境での活性予測は困難である。こ

のため、真に有用な触媒を設計するためには、触媒理論の拡張が必要である。

本年度は、水素酸化・水素生成反応をモデル系として、平衡と非平衡環境での活性相違を理解するための理論構築を行った。その結果、従来理論では活性が低いと予測される材料でも、非平衡環境では既存の最高活性触媒に匹敵する活性を示しうることが明らかとなった。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Ooka H., Nakamura R.: “Shift of the Optimum Binding Energy at Higher Rates of Catalysis”, *J. Phys. Chem. Lett.*, 10 (2019) \*

Li A., Ooka H., Bonnet N., Hayashi T., Sun Y., Jiang Q., Li C., Han H. and Nakamura R.: “Stable Potential Windows for Long-Term Electrocatalysis by Manganese Oxides Under Acidic Conditions”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 58 (2019) \*

He D., Ooka H., Li Y., Jin F. and Nakamura R.: “Phase-selective Hydrothermal Synthesis of Metallic MoS<sub>2</sub> at High Temperature”, *Chem. Lett.*, 48 (2019) \*

(総説)

Ooka H., McGlynn S. E. and Nakamura R.: “Electrochemistry at Deep-Sea Hydrothermal Vents: Utilization of the Thermodynamic Driving Force towards the Autotrophic Origin of Life”, *ChemElectroChem*, 6 (2019) \*

#### ●口頭発表 Oral Presentations

Ooka H., Nakamura R.: “From Thermodynamics to Kinetics: Predicting New Catalysts By Revisiting the

Sabatier Principle” 8th ELSI Symposium “Extending Views of Catalysis”, Tokyo, Japan, Feb. (2020)

Ooka H.: “Balancing Thermodynamics and Kinetics to Achieve Maximum Rates in Catalysis”, iTHEMS Weekly Meeting, Saitama, Japan, Jan. (2020)

Ooka H., Nakamura R.: “Shift of the Optimum Binding Energy at Higher Rates of Catalysis”, The 4th Solar Fuel Material Workshop, Seoul, Korea, Sept. (2019)

Ooka H., Nakamura R.: “Difference in the Binding Energy Which Optimizes the Rates and Overpotentials of Electrocatalysis”, 3rd International Solar Fuels Conference-Young, Hiroshima, Japan Nov. (2019)

大岡英史, 中村龍平: “結合エネルギーから見た電極触媒の開発”, 電気化学会秋季大会, 山梨, 9月 (2019)

Ooka H., Nakamura R.: “Element Strategy of Oxygen Evolution Electrocatalysis Based on the Reaction Mechanism of Manganese Oxide, Iron Oxide, and Iridium Oxide”, 2019 North American Catalysis Society Meeting, Chicago, USA, Jun. (2019)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

Ooka H., Nakamura R.: “Difference in the Binding Energy Which Optimizes the Rates and Overpotentials of Electrocatalysis”, 3rd International Solar Fuels Conference/International Conference on Artificial Photosynthesis 2019 (Joint symposium), Hiroshima, Japan, Nov. (2019)

Ooka H., Nakamura R.: “Understanding Catalytic Efficiency based on the Topology of the Reaction Network”, CSRS Interim Report, Wako, Japan, Nov. (2019).

## XIV-021 Exploring New Possibilities of Phthalocyanines through Supramolecular Approaches

Name: Cheng ZHANG

Host Laboratory: Information Transforming Soft Matter Research Unit  
RIKEN Center for Emergent Matter Science

Laboratory Head: Daigo MIYAJIMA

Recently, researchers pay more and more attention to polar materials due to its promising applications such as bulk photovoltaic effects, shift-current theory,

spin filter effects, and so on. The bulk photovoltaic effect involves direct current generation in noncentrosymmetric semiconductors or insulators under light ir-

radiation. However, most of the reported literatures were mainly for inorganic ferroelectrics such as oxides, chalcogenides and hybrid perovskites, while studies on inorganic materials are quite limited. We designed and synthesized a subphthalocynine (SubPc) derivative (SubPc-SC<sub>12</sub>) having C<sub>3v</sub> symmetry with hexagonal columnar liquid crystalline property exhibiting spontaneous polarization along the columnar axis. The polarization orientation is developed under E-field application only when cooling the sample from the isotropic phase to liquid crystal phase. Moreover, after applying DC E-field, the macroscopic polarization has photoresponse and can generate photocurrent under light irradiation after E-field is switched off, which could be applied in organic photodetectors. The devices based on SubPc-SC<sub>12</sub> can operate at 0.5 V with an ultra-low dark current density of 0.08 pA cm<sup>-2</sup> and a high on/off current ratio of 6.6 × 10<sup>3</sup> with the simple device structure, just sandwiching the SubPc-SC<sub>12</sub> by two ITO electrodes. This is the first example of organic photodetection device based on just one material with bulk photovoltaic effects.

However, although we successfully utilized the macroscopic polarization into photodetector applications, the relationship between the polarization and photocurrent generation is still unclear. It is highly emergent to develop the polar single crystals to quantitatively investigate the relationship and propose the rule/princi-

ple to promote the development of the field of organic optoelectronics. Through our efforts, just by replacing the  $\alpha$ -H atoms of SubPc to F atoms, we successfully obtained the polar crystals with perfect hexagonal columnar arrangement and fully  $\pi$ -surface overlap which is never reported yet in organic single crystals with only one component. Now we seriously study the shift-current theory and spin-filter effects based on this polar crystal with good semiconductivity.

### ●Poster Presentations

#### Conferences

Zhang C., Miyajima D., Aida T.: “Bulk Photovoltaic Effects with Spontaneous Polarization of Subphthalocynines” The 2019 Self-Assembly and Supramolecular Chemistry GRC, Les Diablerets, Switzerland, 2019, May 18-24.

Zhang C., Miyajima D., Aida T.: “Bulk Photovoltaic Effects with Spontaneous Polarization of Subphthalocynines” Organic Photoelectronics: Theory, Materials, Interfaces, and Spectroscopy, RIKEN, 2019, July 25-26.

#### Papers

Zhang C., Nakano K., Nakamura M., Araoka F.,\* Tajima K., Miyajima D.\*: Noncentrosymmetric Columnar Liquid Crystals with the Bulk Photovoltaic Effect for Organic Photodetectors. *J. Am. Chem. Soc.* 2020, 142, 3326-3330.

## XIV-022

### Three-Dimensional Organic Semiconductors: A Non-Fullerene Approach

Name: Mitisidike RUKEYAMU

Host Laboratory: Emergent Molecular Function Team

RIKEN Center for Emergent Matter Science

Laboratory Head: Kazuo TAKIMIYA

Three dimensional (3D) conjugated molecular systems hold the potential to further improve the electronic properties of organic semiconductors via facilitating efficient charge transport in multiple dimensions. However, in 3D molecular systems the high dimensionality in the  $\pi$ -conjugated framework are often found to be intransferable into a higher dimensional electronic

structure in the solid state. On the other hand, for 3D molecular systems, it has been a challenge to balance a high crystallinity and high dimensionality. These challenging factors thus have been largely preventing 3D molecular structures from reaching their full potential. Therefore, in this project, a series of four molecules having an increased number of NTI (a thiophene-fused

naphthalene diimide, namely naphtho[2,3-b] thiophene diimide) from 3 to 6 attached adjacent to each other on a benzene core (NTI<sub>x</sub>, x=3-6), finally leading to a six-armed structure (NTI<sub>6</sub>), were synthesized using a simple direct arylation reaction in satisfactory high yields. After thoroughly characterizing their structure using various characterization techniques, their photophysical and electronic properties were investigated in details in a comparative manner. The molar extinction coefficient of the molecules and through space electronic interaction between NTI units in the reduced state strongly increased as the number of NTI in the molecule increases. While NTI<sub>6</sub> owned an exceptionally high crystallinity with excellent solubility, other molecules appeared to be non-crystalline. Owing to the peripheral LUMO distribution of NTI, which resides mainly on the outer C-C bond and the oxygen atoms, that can create a 3D electronic structure in NTI<sub>6</sub> and its high crystallinity, NTI<sub>6</sub> showed excellent electron transport properties and photovoltaic behaviour; For NTI<sub>6</sub>, air-stable electron mobilities around 0.02 cm<sup>2</sup>/V.

s is extracted from field-effect transistors of spin-coated thin-films, while other NTI<sub>x</sub> molecules (NTI<sub>3-5</sub>) showed two magnitude order lower mobility. The air-stable and high mobility of NTI<sub>6</sub> is certainly the highest among six-armed 3D conjugated molecules. Inverted solar cells with NTI<sub>6</sub>: PTB7 (a donor polymer based on 4,8-bis(5-(2-ethyl-hexyl)-thiophene-2-yl) and thieno[3,4-b] thiophene) blend as the active layer gave an average power conversion efficiency over 5 %, again largely outperforming other NTI<sub>x</sub> molecules and six-armed 3D molecules in general. For star-shaped 3D molecules, it has been a challenge to concurrently gain both high dimensionality and crystallinity. Our design strategy could thus provide an approach to this long-standing issue.

#### ●Publications

Original Paper

Matsidik R. and Takimiya K.: A Highly Crystalline Six-armed N-type 3D Molecule with High Electronic Performance. Under preparation.

#### XIV-023

#### 静電反発力制御を基軸とする、無機ナノシートからなる

#### 3次元・4次元構造体の構築：

#### 光学・力学・輸送における革新的機能創成を目指して

#### Development of 3D and 4D Structures of Inorganic Nanosheets based on the Control of Electrostatic Repulsion: Toward Innovative Optical, Mechanical and Transport Functions

研究者氏名：佐野 航季 Koki Sano

受入研究室：創発物性科学研究センター

創発生体関連ソフトマター研究チーム

(所属長 石田 康博)

生体では、たんぱく質などの異方性コロイドが自己組織的に3次元構造体を形成するとともに、その構造を時空間に渡って制御することによって、高度な機能を実現している。このような洗練されたシステムを人工系で構築し、生体機能をも凌駕する革新的機能の創成へと繋げることは、材料化学分野の目標の1つである。しかしながら、人工的に合成した異方性コロイドを空間的に制御された3次元構造体へと集合させるのは未だに困難であり、空間的かつ時間的に制御された構造体の構築は未踏の領域である。本研究では、無機ナノシート間に働く静電反

発力の精密制御を基軸として、まず、無機ナノシートからなる空間的にデザインされた3次元構造体の構築を行い、(1) 光学物性及び(2) 力学物性における革新的機能の創成を目指す。次に、時間的に発展していく構造体の構築とその制御を目標とし、(3) 物質輸送機能の実現へと展開する。

本年度は、主に上記(2)と(3)について研究を行った。(2)に関しては、一軸配向した無機ナノシートを埋め込んだ水ゲルにおいて、系のイオン濃度を減少させることでナノシート間に働く静電反発力が増大する結果、ナノシートのドメイン構

造がポリドメインからモノドメインへと変化することが明らかになった。この現象は、小角X線散乱測定及び共焦点レーザー走査型顕微鏡測定によってナノスケール・マクロスケールの両面から確認している。また、これらの構造変化の結果、得られるゲルの力学的異方性も変化することが明らかになった。

(3) に関しては、当初の計画は基本的に全て達成されている。具体的には、化学的刺激が引き起こすナノシートの協働的運動において、一方向へと伝播するナノシートの配向波の波長及び速度の制御に成功した。また、この波の発生メカニズムをサーモトロピック液晶の理論を用いることによって説明することにも成功している。さらに、異なるサイズ・表面電荷のマイクロ粒子を利用することによって、この波の輸送機能についての探索も行った。

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Sano, K., Igarashi, N., Arazoe, Y. O., Ishida, Y., Ebina, Y., Sasaki, T., Hikima, T. and Aida, T.: "Structural Colored Water with Cofacially Aligned Nanosheets", *Polymer*, 177, 43-48 (2019).\*

(解説論文)

Sano, K.: "Structural Colored Water with Cofacially Aligned Nanosheets", *J. Jpn. Soc. Colour Mater.* 92,

345-348. (2019).\*

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

佐野航季, 石田康博, 謝曉晨, 荒岡史人, 海老名保男, 佐々木高義, 相田卓三: "無機ナノシートの協働的運動による進行波の発現", 2019年日本液晶学会討論会, つくば, 9月(2019).

佐野航季, 海老名保男, 佐々木高義, 相田卓三, 石田康博: "無機ナノシートの自己組織化による構造色", 第68回高分子討論会, 福井, 9月(2019).

佐野航季, 海老名保男, 佐々木高義, 相田卓三, 石田康博: "無機ナノシート間に働く静電反発力を利用した異方性ハイドロゲル", 第68回高分子討論会, 福井, 9月(2019).

佐野航季: "Propagating Wave by Coherent Motion of Physically Interlocked Nanosheets", CEMS International Symposium on Supramolecular Chemistry and Functional Materials (CEMSupra 2019), 東京, 12月(2019).

佐野航季, 海老名保男, 佐々木高義, 相田卓三, 石田康博: "Spatially and Temporally Ordered Structure of Inorganic Nanosheets", 日本化学会第100春季年会, 野田, 3月(2020), 発表予定.

### XIV-024 迅速誘導合成による植物ホルモンの作用機構解明分子ツールの開発 Development of Molecular Tools to Reveal Mechanism of Plant Hormones by Rapid Derivatization

研究者氏名: 齋藤 雄太朗 Yutaro Saito  
受入研究室: 環境資源科学研究センター  
分子生命制御研究チーム  
(所属長 萩原 伸也)

植物ホルモンは、受容される器官によってその作用が異なることが知られている。このような植物ホルモンのある器官での特異的な作用は、遺伝学的手法のみで解明することが困難である。この問題を解決するには、変異を導入した受容体に特異的に結合するリガンドを設計し、天然型のリガンド-受容体ペアとは独立してシグナル伝達を誘起する人工ペアを構築するBump-Hole法が有効である。改変型受容体を特定の器官で発現させることで対象の植物ホ

ルモンの効果を器官特異的に誘起することができる。この手法では、天然型受容体には結合せず変異型受容体に対し高い結合能を示す人工植物ホルモンの開発が必須である。しかし、最適な人工植物ホルモンの探索は、多大な労力や時間を要し、研究のボトルネックとなる。そこで、本研究では、候補化合物の小規模ライブラリーを作り、ライブラリー化合物それぞれを誘導化する「ライブラリー拡張法」によって大規模なライブラリーを作る。そして、獲得

したライブラリーの中から最適な化合物を選定し、人工植物ホルモンとして機能する分子ツールを開発する。この手法によって、従来の合成法に比べ迅速

に分子ツールを開発することができる。さらに開発した分子ツールを用いて植物ホルモンの作用機構の解明研究を行うことを目的とした。

XIV-025

### DNA複製蛍光可視化システムの開発とこれを用いた Hi-Cコンパートメント制御因子の網羅的探索

#### Development of a Fluorescent DNA Replication Reporter and Its Application to Genome-Wide Screening of Hi-C Nuclear Compartment Regulators

研究者氏名: 大字 亜沙美 Asami Oji  
受入研究室: 生命機能科学研究センター  
発生エピジェネティクス研究チーム  
(所属長 平谷 伊智朗)

Hi-C法を用いたゲノム高次構造解析によると、DNAは核内でMb単位のとポロジカルドメイン(TAD)を形成し、複数のTADはさらに集合して転写されやすいAコンパートメントとされにくいBコンパートメントに空間的に分かれている。A/Bコンパートメントの形成はゲノム機能を調節する上で重要と考えられるが、その制御メカニズムは全く分かっていない。私の所属する研究室では、最近コンパートメント分布とDNA複製時期がゲノムワイドに、しかも動的に相関していることを見出した。S期初期に複製する領域と、後期に複製する領域は、それぞれA、Bコンパートメントとよく一致する。この知見から、任意領域のDNA複製時期を可視化できれば、A/Bコンパートメント分布が推定でき、3Dゲノム制御機構へのアプローチが可能になると考えた。そこで本年度は、DNA複製時期が既知である4つのゲノム領域を選び、その複製状態すなわちDNAコピー数をマウス胚性幹(ES)細胞で検出するシステムの構築を試みた。さらに本システムをゲノムワイドCRISPR-sgRNAスクリーニングに適用し、マウスES細胞の核内コンパートメント制御を司る制御因子の網羅的同定を目指した。

(1) マウスES細胞の標的領域にGFP遺伝子を導入し、複製によるGFP遺伝子の倍加でGFP蛍光強度が変化するかどうかをフローサイトメーターで測定した。すると、S期初期にGFPが複製する細胞は、S期が進むに連れてGFP強度が強くなる傾向が見ら

れた一方、後期にGFPが複製する細胞のGFP強度はS期を通じて一定であった。さらに、GFP導入領域で複製時期異常を示す変異ES細胞株を樹立し、GFP蛍光と複製時期が相関していることを示した。ゆえに、システムは期待通りDNA複製時期を反映していると結論づけた。

(2) 樹立した4細胞株のうち2細胞株を使用し、共同研究者である京都大学の遊佐宏介教授の協力を得てゲノムワイドCRISPR-sgRNAスクリーニング実験を実施した。

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(学会)

大字亜沙美, 平谷伊智朗: “核内コンパートメント制御因子のスクリーニングに向けたDNA複製タイミング可視化システムの開発”, 第42回日本分子生物学会年会, 博多, 12月(2019)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

大字亜沙美: “DNA複製レポーターシステムの開発と、これを用いた核内コンパートメント制御因子の網羅的同定”, 第13回日本エピジェネティクス研究会年会, 横浜, 5月(2019)

大字亜沙美, 平谷伊智朗: “核内コンパートメント制御因子の網羅的同定に向けたDNA複製時期可視化レポーターシステムの開発”, 蒲郡, 6月(2019)



XIV-026

**神経細胞の樹状突起におけるタンパク質の局所分解**  
**Local Degradation of Neuronal Protein in Dendrites**

研究者氏名: 持田 啓佑 Keisuke Mochida  
受入研究室: 脳神経科学研究センター  
タンパク質構造疾患研究チーム  
(所属長 田中 元雅)

長い軸索や樹状突起を有する神経細胞では、細胞核から離れたこれら領域に適切かつ迅速に必要なタンパク質を供給し、また不要となったときにはそれらタンパク質を適宜除去する仕組みが必要となる。神経突起内で局所的に起こるタンパク質合成は、記憶・学習や情動を支える基本的な生命現象であり、その異常は精神・発達障害の原因となる。一方で、ユビキチン・プロテアソーム系やオートファジーを介したタンパク質分解が神経突起内の局所的プロテオームに与える影響については不明な部分が多く残されている。本研究では、神経刺激にともなって起こる局所的なタンパク質分解に着目し、分解基質の決定やその生理的意義の解明を目指す。また細胞内の特定領域における局所的なプロテオーム変動を解析するための新規手法の開発を行う。

近年、ビオチンリガーゼであるBirAや大豆由来アスコルビン酸ペルオキシダーゼAPEX2などを用いた近接依存タンパク質標識法が細胞内微小領域のプ

ロテオーム解析に盛んに用いられている。一方で、これら手法はタンパク質の拡散等の影響により空間的な分解能に制限がある。これらの問題点を克服するため、本年度は固定処理した細胞を用いて細胞内微小領域のプロテオームを決定する新規手法の確立を目指した。オルガネラ膜上の微小領域をモデルとして、実験系の構築を進めた。

本年度は、抗体等を用いてオルガネラ膜上の特定の微小領域に存在するタンパク質群を網羅的にラベルする方法を検討した。条件の検討は完了しつつあり、定量的プロテオーム解析により、標的とするタンパク質群がラベルされているか確認を進めている。今後、他の細胞内微小領域のプロテオーム解析や培養神経細胞への応用を進める。さらに神経刺激等が神経突起内微小領域のプロテオームに与える影響を調べるとともに、局所的なタンパク質分解が果たす役割を解析していく。

**XIV-027 高速超解像顕微鏡法の開発とそれを用いた生細胞内での1分子から細胞規模に跨る確率過程の直接観察**

**Development of the high-speed super-resolution optical microscope system and mathematical analysis of the membrane traffic dynamics of a budding yeast based on high precision measurements using that system**

研究者氏名: 宮代 大輔 Miyashiro Daisuke  
受入研究室: 光量子工学研究センター  
生細胞超解像イメージング研究チーム  
(所属長 中野 明彦)

本研究の目的は、分子動態の定量的な可視化と理論化により、膜交通を制御する分子メカニズムの全容を明らかにすることである。具体的には、①独自の4次元像復元計算論により高速性と超解像を両立させた光学顕微鏡法を開発し、②それにより得られた画像データに基づいて、膜交通を駆動する機能タンパク質群の動態の数値モデルを構築する。

本研究で開発した独自の顕微鏡システムは、時間分解能と空間的分解能を両立し、さらに定量性を保証している点が特徴である。特に時間分解能は空間分解能とトレードオフの関係にあるが、これを克服するために、測定精度そのものを向上させることで、その結果増加した情報量を基に時空間分解能を向上させることを可能にした。具体的には、ニポウ式の

高速共焦点顕微鏡に、検出系として冷却I.I.（イメージインテンシファイア）と高速CMOSカメラを組み合わせることで、個々の光子由来のシグナルを分離して検出し、これを基に光子計数を行う。これによりノイズがなく極めて高いS/N比かつ1光子精度の共焦点顕微鏡画像が得られる。ここからさらに空間分解能を向上させるため像復元計算を行う。これは従来の逆計算法のような対物レンズの透過帯域内の復元とは異なり、透過帯域外を外挿により復元するもので、S/N比次第で空間分解能を大きく改善できる。

本年度は高速超解像顕微鏡法の論文投稿準備（理論、プログラミング、実測データ収集）を主に行った。また、研究成果である高速超解像顕微鏡の他者への利用を促進するため、利用体制の確立やソフトウェア開発も行い、利用者との共同研究に取り組むことで、多分野の専門家との生物種横断的な議論を展開した。さらに顕微鏡装置の更なる開発に向けての技術的な検討や試み（パルスレーザー、3軸高速高精度ステージ、等）を行った。その他に、企業との顕微鏡システムの共同開発の検討や、昨年度出願した国際特許（アメリカ、欧州）の対応などに取り

組んだ。

#### ●口頭発表 Oral Presentations

宮代 大輔：“新規高速超解像顕微鏡法の開発と実用化”，中央大学理工学部 第27回 生命科学セミナー，中央大学後楽園キャンパス，8月（2019）

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

宮代 大輔，中野 明彦：“高速超解像顕微鏡法の開発と数理解析”，オルガネラゾーン班会議，大阪大学 銀杏会館，5月（2019）

Daisuke Miyashiro, Akihiko Nakano: “Development of the high-speed super-resolution optical microscope system and mathematical analysis”, RAPAC, Riken Wako, Sep.(2019)

宮代 大輔，中野 明彦：“高速超解像顕微鏡法の開発と数理解析”，第3回オルガネラゾーン研究会，東京大学 弥生講堂，11月（2019）

Daisuke Miyashiro, Akihiko Nakano: “Development of the high-speed super-resolution optical microscope system and mathematical analysis”，第7回RAPシンポジウム，理研 和光，12月（2019）

## XIV-028

### 組織・形態形成の数理的理解に向けた機械学習法の開発

#### Developing a Machine Learning Algorithm to Decipher Principles of Histogenesis and Morphogenesis

研究者氏名：松本 拓高 Hiroataka Matsumoto  
受入研究室：革新知能統合研究センター  
医用画像解析チーム  
（所属長 佐藤 一誠）

近年、1細胞レベルで網羅的な遺伝子発現量を計測可能とする1細胞RNA-seqが開発されるなど、高い解像度で網羅的な細胞状態を高精度に捉えられる技術が発展してきた。また、遺伝子発現量のみでなく、空間や細胞系譜などの情報を同時計測する技術も開発されてきている。このようなデータを用いることで、組織発生や疾患、老化などで表われる発現ダイナミクスの理解や、細胞分化に関連する細胞型、重要遺伝子の同定が進むと期待されている。ただし、そのようなデータを解析するための計算機的手法は発展途上であり、データの特性を十分に活かすためにも、新しい解析技術の開発が必要である。

本研究では、大規模データから知識抽出するための機械学習のアプローチと、メカニズムの数理的理解を目指す数理生物学的アプローチの2つを統合し、1細胞RNA-seqなどのデータから知識抽出と現象の数理的理解を統合的に行う計算機的手法を開発し、遺伝子、細胞組成、組織・形態形成の各階層におけるメカニズムの解明を目指す。

本年度は、以下の3つの研究を軸に、組織・形態形成などのダイナミクスを理解するための機械学習法の開発に取り組んだ。

(1) 放射線影響研究所および大阪大学のグループとの共同研究として、成体マウスの複数の臓器におけ

るモザイク変異の頻度を計測することで、マウス初期発生におけるモザイク変異の発生系譜を再構築するアルゴリズムを開発した。その上で、再構築した系譜を元に各臓器における各系譜の組成を推定し、初期発生における生殖系列の発生機構などを解析した。

(2) 1細胞RNA-seqのリードカウントデータから、細胞種間で発現量に差のある領域を検出するためのアルゴリズムを開発した。本手法は、リファレンス転写産物を用いた発現変動解析において見逃される、新規転写産物の発現量変化を検出することを目的とする。実データに本手法を適用した結果、細胞分化に重要な因子を検出できることを示した。

(3) 名古屋大学のグループとの共同研究として、線虫の時系列神経活動データから本質的な神経活動のダイナミクスの潜在空間を学習し、行動パターンと

の関連を調べた。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

Matsumoto H., Hayashi T., Ozaki H., Tsuyuzaki K., Umeda M., Iida T., Nakamura M., Okano H. and Nikaide I. : “An NMF-based approach to discover overlooked differentially expressed gene regions from single-cell RNA-seq data”. *NAR Genomics and Bioinformatics*, lqz020 (2020)\*

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

Matsumoto H. and Ikeda M. : “Embedding neuronal dynamics to connect neuronal activity to behavioral patterns”, IIBMP2019, Tokyo, Japan, Sep 2019

XIV-029

### “光るRNA”によって明らかにする、RNAのかたちを介した 遺伝子発現制御ネットワークとその機能

#### Unveiling Gene Expression Regulation by RNA G-quadruplex using fluorogenic RNA

研究者氏名: 有吉 哲郎 Tetsuro Ariyoshi  
受入研究室: 生命機能科学研究センター  
細胞極性統御研究チーム  
(所属長 岡田 康志)

本年度は研究目標である「細胞内で光るRNAを用いたG4構造制御タンパク質の網羅的同定」に向けた実験系の構築を遂行した。まず、我々が開発した“RNAのG4構造形成依存的に蛍光を発する新規蛍光RNA”(以降“新規蛍光RNA”とする)を安定発現するHEK293T細胞株の樹立を試みた。一般的に用いられるCMVプロモーターの下流で新規蛍光RNAを発現させた場合、細胞毒性のために高発現株は得られないことがわかった。そこで薬剤依存的に新規蛍光RNAを発現させる株の樹立を試みたところ、十分明るい輝度を持つ安定発現株が得られた。次に、プルーフオブコンセプトとして、先行研究においてG4構造を制御する可能性が示唆されたタンパク質を過剰発現させることで新規蛍光RNAの輝度変化が起こることを確かめた。レンチウイルスを用いてG4構造制御タンパク質の候補を過剰発現させたところ、一部のタンパク質が新規蛍光

RNAの蛍光強度を有意に低下させることが認められた。このことから、新規蛍光RNAの蛍光強度を指標として確かにG4構造制御タンパク質のスクリーニングが可能であることが示された。さらに、とても興味深いことに、一部のタンパク質を過剰発現させたところ新規蛍光RNAの輝度が逆に向上することが明らかとなった。このことはG4構造を積極的に安定化させる活性をもったタンパク質が存在することを示唆しており、これまでに報告されていない活性を持ったタンパク質の発見に繋がる可能性がある。

以上の過剰発現スクリーニング系の構築に加え、本年度はロックアウトスクリーニング系の構築も進めた。すなわち、新規蛍光RNAの輝度が低いことがわかっているES細胞において薬剤依存的に新規蛍光RNAを発現させる安定発現株を樹立することに成功し、また遺伝子網羅的に特定遺伝子をロック

アウトあるいはノックダウンさせる実験系の構築を進めた。来年度以降はHEK293T細胞における過剰発現スクリーニングとES細胞におけるノックアウトスクリーニングを並行してすすめ、G4構造を解消させる活性を持ったタンパク質及び逆にG4構造を安定化させる活性を持ったタンパク質の同定を進めてゆく。

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

有吉哲郎, 岡田康志: “Imaging endogenous mRNA expression dynamics with a bright fluorogenic

RNA”, 第19回日本蛋白質科学会年会第71回日本細胞生物学会大会合同年次大会, 神戸, 6月(2019)

有吉哲郎, 岡田康志: “Imaging transcriptional dynamics of the endogenous gene with a bright fluorogenic RNA”, 第57回日本生物物理学会年会, 宮崎, 9月(2019)

Tetsuro Ariyoshi, Yasushi Okada: “Imaging endogenous mRNA expression dynamics with an RNA counterpart of a GFP”, 2019 ASCB|EMBO Meeting, Washington DC, 12月(2019)

### XIV-030

#### 植物種皮より分泌されるペプチドホルモンの 同定及び種子圏における機能解明

#### Identification and Functional Characterization of Peptide Hormones Secreted from the Plant Seed Coat to the Spermosphere

研究者氏名: ツァイ イールン Tsai, Yi-Lun  
受入研究室: 環境資源科学研究センター  
適応制御研究ユニット  
(所属長 瀬尾 光範)

As a natural border the plant seed coat must communicate with many different cell types, both with other seed tissues and with other soil microorganisms. Recently small signaling peptides (SSPs) have been shown to be an important class of plant signaling molecules, however their function's remain largely unknown due to their small size and vast number. Since the seed coat is likely to mediate signaling through SSPs, I propose to identify SSPs secreted from the seed coat and characterize their functions. Small secreted proteins highly expressed in seed coats will be identified from the Arabidopsis proteome and transcriptome as putative seed coat SSPs. Loss-of-function mutants for these seed coat SSPs will then be isolated and analyzed for seed development defects. In addition, the microflora composition around these seeds in fields will be surveyed to determine how SSPs mediate communication with other soil microorganisms. Seed coat has been utilized in the past for its strength in genetic analyses, however its biological relevance has yet to be delineated. This proposed research aims to determine

the role of seed coat in signaling, by taking advantage of the seed coat as a genetic model system to address the outstanding questions concerning plant SSP functions.

#### ●誌上发表 Publications

(原著論文)

Oota M., Tsai A.Y., Aoki D., Matsushita Y., Toyoda S., Fukushima K., Saeki K., Toda K., Perfus-Barbeoch L., Favery B., Ishikawa H., and Sawa S.: “Identification of naturally-occurring polyamines as nematode *Meloidogyne incognita* attractants”, *Mol Plant* pii: S1674-2052(19)30407-1 (2019)\*

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

Tsai A.Y., Seo M.: “Identification and Functional Characterization of Peptide Hormones Secreted from the Plant Seed Coat to the Spermosphere”, Riken CSRS Interim Progress Report, Wako, November (2019)

**Evolvability of multi-copy genomes: balance between  
stability and evolution**

研究者氏名: 大林 龍胆 Ohbayashi Ryudo  
受入研究室: 生命機能科学研究センター  
多階層生命動態研究チーム  
(所属長 古澤 力)

本研究ではゲノム倍数化が進化に及ぼす影響とその過程を実験的検証により解き明かすことを目的とした。ゲノム倍数化は、現存する様々な生物種において観測される形質である。古くから倍数体生物は環境変動などへの適応能力が高いことが示唆されているが、その基本原理の解明には至っていない。ゲノム倍数化と進化との関係について、有名な仮説として大野乾によって提唱されたゲノム重複説がある。これは全ゲノム重複により冗長性が生じ、正常な遺伝子を保持したまま、コピー遺伝子を改変でき、新規形質の進化が促進されるという仮説である。この仮説に基づくとゲノム倍数化によって生じる冗長性は進化を加速させることになる。他方、進化速度を考えた場合、1細胞あたりのゲノムコピー数が多い状態では、1つのゲノムに変異が入っても、その他の正常コピーによってその効果が打ち消されるまたは弱められるため、変異の効果が表現型として現れにくい。したがってゲノム倍数化により進化速度は遅くなることになる。本研究では、これまでの理論のみに基づくと一見矛盾する、ゲノム倍数体の進化を実験生物学により定量的に捕らえ、ゲノム倍数化と進化の関係に存在する普遍原理の解明を目指す。

本年度はシアノバクテリアをモデル生物とし、異なる倍数性生物種において進化速度の定量を行なった。まず初めにシアノバクテリアにおいて、倍数性が異なる複数種を系統的に同定した(論文投稿中)。この同定した異なるゲノム倍数性種において、進化速度の検証を行なった。その結果、予測に反し倍数性が異なる種においても進化速度はほとんど変わらないことがわかってきた。さらに、この進化原理に迫るため、理論と実験の両面から検証を進めている。今後は実際にゲノム倍数性が進化へ与える影響を検証するため、実験室進化実験を計画中である。

●誌上発表 Publications

(原著論文)

- Ohbayashi R., Nakamachi A., Hatakeyama TS., Watanabe S., Kanasaki Y., Chibazakura T., Yoshikawa H. and Miyagishima SY.: “Coordination of Polyploid Chromosome Replication with Cell Size and Growth in a Cyanobacterium”, *mBio*, 10:e00510-19 (2019)\*
- Watanabe S., Saito S., Suezaki Y., Seguchi T, and Ohbayashi R.: “Specific binding of DnaA to the DnaA box motif in the cyanobacterium *Synechococcus elongatus* PCC 7942” *The Journal of General and Applied Microbiology*, (2019), in print
- Ohbayashi R., Hirooka S., Onuma R., Kanasaki Y., Hirose Y., Kobayashi Y., Fujiwara T., Furusawa C., and Miyagishima S.: “Evolutionary changes in DnaA-dependent chromosomal replication in cyanobacteria”, (2020), submitted

●口頭発表 Oral Presentations

- Ohbayashi R., Hatakeyama TS.: “Impact of Polyploidy on the evolutionary rate”, 第57回日本生物物理学会年会, 宮崎シーガイア, 9月 (2019), 招待講演
- 大林龍胆: “複数コピー染色体において複製システムが及ぼす進化可能性”, 第13回ゲノム微生物学会若手の会, 伊豆, 10月 (2019)
- 大林龍胆: “倍数ゲノムの複製、遺伝様式から紐解くシアノバクテリア(倍数体)の進化可能性”, 藍藻の分子生物学2019, かずさアカデミアパーク, 11月 (2019), 招待講演
- 大林龍胆, 廣岡俊亮, 大沼亮, 広瀬侑, 兼崎友, 宮城島進也: “シアノバクテリアの染色体複製におけるDnaA依存性進化”, 第43回日本分子生物学会年会, 福岡, 12月 (2019), 招待講演

XIV-032      **ゼブラフィッシュの予測コーディングによる意思決定機構の解明**  
**Functional Analysis of Predictive Coding Circuits**  
**for Decision-Making in Zebrafish**

研究者氏名: 谷本 悠生 Yuki Tanimoto  
受入研究室: 脳神経科学研究センター  
意思決定回路動態研究チーム  
(所属長 岡本 仁)

本研究では、ゼブラフィッシュが未来の状況を予測し、それをもとに正しい行動を選択する際に働く神経回路を解明することを目的とする。ゼブラフィッシュは、仮想空間において青色領域に留まると電気ショックによる罰を受け、赤色領域に留まると罰を免れるという経験を繰り返すと、やがてそのルールを学習して青色領域に置かれると事前に赤色領域へと回避するようになる。この過程で、ゼブラフィッシュの淡蒼球に相当する脚内核から大脳皮質へ投射する軸索末端の神経活動を計測したところ、脚内核は学習の進行に応じて青色領域に対しては活性化し、赤色領域に対しては抑制されるようになることが判明した。さらに、この活動は赤色領域へ移動することができないオープンループでは増強された。以上の結果は、ゼブラフィッシュの脚内核は学習によって獲得した「周囲の状況が危険か安全か」の予測情報をコードし、それを大脳皮質に伝えていることを示している。今後は脚内核-大脳皮質経路の神経活動を光遺伝学的に操作しながら、大脳皮質の神経細胞活動と行動の計測を行い、脚内核の活動が大脳皮質活動や意思決定に呈してどのような影響する

かを解明する。さらに、脚内核の特徴的な活動パターンを形成するメカニズムとして、線条体の直接路と間接路による脚内核の活動制御の可能性が考えられるため、線条体の神経活動計測も試みる。

● **ポスター発表 Poster Presentations**  
(学会)

谷本悠生, 鳥越万紀夫, イスラム タンビル, 青木亮, 柿沼久哉, 岡本仁: “意思決定中のゼブラフィッシュの大脳基底核-皮質経路の神経活動ダイナミクス”, NEURO2019, 新潟, 7月 (2019)

Tanimoto Y., Torigoe M., Islam T., Aoki R., Kakinuma H., Okamoto H. : “Calcium imaging of basal ganglia output to dorsal pallium during decision-making in adult zebrafish”, 2019 Cold Spring Harbor meeting: Zebrafish Neural Circuits and Behavior”, Cold Spring Harbor, USA Nov. (2019)

谷本 悠生 : “Basal ganglia output to cortex encodes predictive information for goal-directed behavior in zebrafish”, 次世代脳プロジェクト 冬のシンポジウム, 東京, 12月 (2019)

XIV-033      **Global and Quantitative Analysis of Neuronal RNA Granules**

Name: Marek KRZYZANOWSKI

Host Laboratory: Laboratory for Protein Conformation Diseases

RIKEN Center for Brain Science

Laboratory Head: Motomasa TANAKA

Expression of the genetic information consists of several steps, including mRNA transport and translation. In neuronal cells, delivery of specific mRNAs to dendrites for local translation allows modulation of synaptic strength and consequently underlies higher brain functions such as learning, memory and emotions. Delivery of mRNAs to the dendrites occurs in the

form of RNA transport granules, which contain ribosomes, translation factors and RNA-binding proteins. However, despite the potential significance of RNA granules for higher brain functions the mechanisms governing assembly and regulating neuronal RNA granules are unclear. Moreover, there is currently no single established method to isolate them from a vari-

ety of sources, to follow their dynamics or changes in a global and quantitative way.

The scope of this research project is to comprehensively investigate the composition and function of neuronal RNA granules to identify novel factors involved in RNA granule assembly, mRNA transport and local translation. To this end, I am developing a biochemical method to purify RNA granules from mouse brain and cultured cortical neurons. Next, I will characterize the composition of neuronal RNA granules with mass spectrometry and RNA sequencing to identify their protein and RNA components, respectively.

At this initial stage of the project I have confirmed the presence of RNA granule marker proteins in the biochemically isolated RNA granules and their purity from other major cellular components. Recently, with the use of quantitative mass spectrometry I have analyzed the protein composition of RNA granules puri-

fied from mouse brains of various ages. Preliminary results identified a number of proteins potentially enriched in RNA granules, including some that have not been previously characterized in the context of neuronal function or local translation in the dendrites. Next, I will validate the presence of the newly identified RNA granule components with other methods and investigate their role in RNA granule assembly and function. In the future I will apply this methodology to mouse models of neuropsychiatric-diseases to identify the components of RNA granules deregulated in mental diseases such as autism-spectrum disorders. Similarly, in cultured neurons, I will investigate the dynamic changes to RNA granules upon neuronal stimulation. Together, this study has a potential to reveal a number of mechanistic insights into the biology of RNA granules that will advance our understanding of both their physiological and disease-related roles.

**XIV-034**

### **Modulation of the Strength of Emotional Memories by High States of Anxiety**

Name: Nur Zeynep GUNGOR

Host Laboratory: Laboratory for Neural Circuitry of Learning and  
Memory, RIKEN Center for Brain Science  
Laboratory Head: Joshua JOHANSEN

Central amygdala (CeA) is a brain area involved in fear learning and expression, and contains a moderate number of enkephalin (ENK) expressing cells. By selectively expressing calcium indicators in the pENK-cre-knock-in mice line and using a miniature microscope mounted to animal's head, the activity of pENK cells was imaged in vivo. When the animal received electrical foot-shocks, a strong sustained activity outlasting the foot-shock exposure was observed. When a neutral auditory tone was paired with the foot-shocks, animal learned that the tone predicts the shock. However, the pENK cells were not active during the tone. Accordingly, the inhibition of the pENK cells during the tone and shock did not change animals' fear responses, suggesting that inhibition during the shock and post-shock period might be necessary to observe any changes in behavior. The inhibition was achieved

by hyperpolarizing the cells through activating the virally introduced light-sensitive proton pump archaerhodopsin (Arch) with a laser light delivered to the animals' head by fiber-optic cables.

We also found that pENK cells were active during rescue from a hot plate. In this test, the animals were put into a chamber with an uncomfortably heated floor. After a short exposure time, the animals were rescued either by the experimenter's hand, or by a small plastic platform. pENK cells were active when the animal made contact with either the experimenter or the platform. Interestingly some pENK cells selectively encoded the experimenter's hand and were consistently active whenever they were handled, even outside of the hot plate chamber. The rescuer platform, on the other hand, did not acquire such a representation but in platform experiments, returning home increased the activ-

ity of pENK cells. We also observed that animals chose to spend more time with the rescuer platform (versus another familiar platform) in both heated and non-heated hot plate chamber. Moreover, the animals' preference for the rescuer platform could be modulated by the aversiveness of hot plate test (controlled by the level of heat and exposure times). In a mildly aversive version, we observed that the animals were almost indifferent to the rescuer platform. However, when animals were tested with using the same parameters but inhibiting the pENK cells with Arch, they demonstrated a strong preference for the rescuer platform. Overall, these results suggest that activity in CeA ENK cells are observed during exposure to noxious stimuli and might specifically evoke an opponent process to balance the negative effects of aversive situations and encode a relief signal. In the absence of such a buffering

mechanism, animals demonstrate exaggerated fear learning.

In another line of experiments, we tested whether exposure to stressful situations enhanced fear learning to tones associated with foot-shocks. Exposure to a mobile predator bird, bright lights and loud noise did not affect the anxiety levels of animals, assessed in open field exploration test. In contrast, immobilization, predator-smell and tail suspension increased anxiety levels. However, stressed animals did not demonstrate enhanced fear learning.

#### ● Publications

Review articles

Gungor N. Z., Johansen J: A chronic pain in the ACC. *Neuron*, 102, 5 (2019)

### XIV-035      **Research topic Investigation of manipulation of interneuron activity on hippocampal memory formation**

Name: Vladislav SEKULIC

Host Laboratory: Laboratory for Circuit and Behavioral Physiology

RIKEN Center for Brain Science

Laboratory Head: Thomas MCHUGH

In mammals, the formation of new memories critically depends on the hippocampus. Although primarily composed of excitatory principal neurons, the remaining inhibitory interneurons exhibit a wide array of morphological, molecular, electrophysiological, and synaptic properties<sup>1</sup>. Thus, teasing apart the contribution of different interneuron cell types is required to understand hippocampal function. One prominent type of inhibitory interneuron in the CA1 region of the hippocampus is the O-LM cell (oriens-lacunosum/moleculare), which innervates the distal regions of the dendritic tree of principal excitatory neurons. O-LM cells may play a critical role in switching information flow between novel sensory and contextual information<sup>2</sup>. Furthermore, impairment of CA1 O-LM interneuron activity in a mouse model of Alzheimer's leads to memory deficits<sup>3</sup>. However, how O-LM interneurons

affect local circuit computations in the CA1 hippocampal region is largely unknown.

In the present study, we sought to determine local circuit effects of O-LM cell manipulation during contextual fear conditioning (CFC) tasks in mice. Using somatostatin-Cre (SST-Cre) mice, where somatostatin is a genetic marker for O-LM cells, we measured activity of neurons in dorsal hippocampal CA1 using the Robust Activity Marker (RAM)<sup>4</sup> during new memory formation in CFC tasks. Additionally, we co-injected the SST-Cre mice using either excitatory (hM3D) or inhibitory (hM4D) DREADDs, to measure the effect of either activating or inhibiting SST neurons during conditioning.

Surprisingly, CA1 pyramidal cell RAM expression was increased upon SST cell activation compared to when SST cells were inhibited, contrary to previous work showing the opposite effect on principal granule



cell activity by SST interneuron activation in the dentate gyrus<sup>5</sup>. Additionally, in the SST inactivation group only, putative interneurons in stratum radiatum and lacunosum/moleculare showed markedly increased activation. Furthermore, SST inactivation led to increased freezing behaviour compared to activation. Together with the disinhibitory effect, this indicates the possibility of increased pyramidal cell recruitment during conditioning arising due to lowered inhibition onto apical and distal dendrites, resulting in greater recall during the testing phase. Further investigation of these findings will help shed light on potential CA1-specific microcircuit functional organization in health and disease.

References:

1. Klausberger, T., and Somogyi, P., (2008) *Science* 321, 53.

2. Leão, R., N., Mikulovic, S., et al., (2012) *Nat Neurosci* 15 (11), 1524.
3. Schmid, L. C., Mittag, M., et al., (2016) *Neuron* 92, 114.
4. Sørensen, A., T., Cooper, Y. A., et al., (2016) *eLife* 5, e13918.
5. Stefanelli T., Bertollini, C., et al., (2016) *Neuron* 89, 1074.

#### ●Poster Presentations

Conferences

Sekulic, V., and McHugh, T. J. “Bidirectional manipulation of dendrite-targeting interneurons in CA1 reveals microcircuit-specific dynamics.” The Eighth International Neural Microcircuit Conference, Nagano, Japan 2020, Jan 29-31.

#### XIV-036 ヒト型モデルマウス家系における自閉症リスク遺伝子の多重ヒット仮説

##### The Multiple-hit Hypothesis Of Autism Risk Genes In A Mouse Model Of Patients Family

研究者氏名: 仲西 萌絵 Moe Nakanishi  
受入研究室: 脳神経科学研究センター  
精神生物学研究チーム  
(所属長 内匠 透)

自閉症は、遺伝要因が非常に強く関与する発達障害であるが、その遺伝学的基盤の詳細は明らかでない。現在までの研究は、単一の遺伝子変異と自閉症の関連を明らかにしてきたが、患者の多くでは、複数の遺伝子変異が複合的に遺伝リスクを形成すると考えられている。この複数の遺伝子変異からなる複雑な遺伝リスク（遺伝子の多重ヒット仮説）の解明は、自閉症の発症や重篤度、患者固有の多様な症状がどのように決定されるかという疑問の理解につながる事が期待される。本研究は、自閉症患者が保有する遺伝子変異を導入した新規自閉症モデルマウス、具体的には4つのミスセンス遺伝子変異を保有する遺伝子ノックインマウスを作成し、複数の遺伝子変異によって形成される自閉症遺伝リスクにアプローチすることを目的とする。

本年度は、4つのミスセンス遺伝子変異を保有する遺伝子ノックインマウスを、ゲノム編集技術及び

交配によって作成し、その行動解析を網羅的に行った。結果として、本マウスは、超音波域の鳴き声コミュニケーション (USV) の異常（鳴き声数の減少や、複雑な鳴き声パターンの減少など）、毛繕い行動の増加などの繰り返し行動の異常や、音に対する反応の異常、空間記憶の異常などを呈することを確認した。また、自閉症患者の多くは、睡眠障害を呈することが知られるが、本マウスは概日リズムに異常を呈することも明らかになった。

また、このマウス胎児の脳から、神経細胞を初代培養し、神経細胞形態を観察した。その結果、新規自閉症モデルマウスでは、神経突起の伸長が野生型に比べて短いなど、細胞形態レベルでの異常が観察された。変異を導入した遺伝子のうち2つは神経細胞突起の伸長に関与することが既に明らかになっているため、これら遺伝子機能が変異によって障害されている可能性が考えられる。以上より、本年度は、

自閉症患者で発見された複数の遺伝子変異は行動異常とともに神経細胞の形態異常に関与することを明らかにした。

#### ●誌上発表 Publications

(総説)

Nakanishi M., Anderson A., Takumi T.: “Recent genetic and functional insights in autism spectrum disorder” Current Opinion in Neurology 32(4):1(2019)\*

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(学会)

Moe Nakanishi., Jun Nomura., Takashi Arai., Eiki Takahashi., Maja Bucan., Toru Takumi “Family model mice with inherited variants found in a family of autism”, 新学術領域研究スクラップ&ビルドによる脳機能の動的制御 第4回領域会議, 浜松, 8月(2019)

XIV-037

### レプチンシグナルによる性成熟開始の神経回路基盤 Neural Circuit Basis of Puberty Onset by Leptin Signal

研究者氏名: 後藤 哲平 Teppei GOTO  
受入研究室: 生命機能科学研究センター  
比較コネクトミクス研究チーム  
(所属長 宮道 和成)

ヒトを含む哺乳動物は、良好な栄養状態においてのみ性成熟を迎え生殖機能を獲得・維持することができる。身体の良い栄養状態下では、脂肪細胞から分泌されるレプチンが脳で受容され、視床下部にある生殖中枢を駆動させると考えられている。しかし、生殖中枢を構成する主要なニューロンにはレプチン受容体が発現しておらず、レプチンを受容して性成熟を促進する責任ニューロンの実体や、生殖中枢にいたる神経回路が明らかになっていない。本研究ではこれらの課題を解決することによって性成熟のメカニズムを神経回路レベルで解き明かすことを目的とする。

本年度は、既知のレプチン受容脳領域である腹側乳頭体前核が性成熟に関与するかについて検討した。また、新規レプチン受容脳領域を検出するツールとして性成熟不全・誘導モデルマウスの作製および実験系の構築を行った。

(1) 腹側乳頭体前核特異的にレプチン受容体を欠損するマウスを作製したところ、成長曲線および性成熟に関連する各種パラメーターはコントロール群と同等だった。遺伝学的に腹側乳頭体前核のレプチン受容ニューロンは性成熟の必要条件ではないことが分かった。

(2) ラットでは幼若期に制限給餌を行うことによって性成熟が到来しないことが報告されている。将来的な逆行性経シナプス標識や光遺伝学・薬理遺伝学

による介入実験を見据え、マウスの性成熟が到来しないような幼若期の制限給餌の条件検討を行い、これを性成熟不全モデルとして確立した。制限給餌中のマウスに対してレプチンを代償投与することによる性成熟誘導モデルの確立を試みている。

(3) 成獣マウスの生殖中枢キスペプチンニューロンから生体内Ca<sup>2+</sup>イメージングの実験系を確立できた。同様に成獣マウスの生殖中枢キスペプチンニューロンの経シナプス標識の実験系を確立した。マウスの性周期モニターは難しいとされてきたが、膣垢像の観察に加えて膣内抵抗値を計測することで、より正確に性周期をモニターできる系を確立した。

#### ●誌上発表 Publications

(総説)

Hirabayashi M., Goto T. and Hochi S.: “Pluripotent stem cell-derived organogenesis in the rat model system”, Transgenic research, 28 287-297(2019)

#### ●口頭発表 Oral Presentations

Goto T., Hirabayashi M.: “Generation of mouse pluripotent stem cell-derived kidney by interspecific blastocyst complementation”, The 42nd Annual Meeting of the Molecular Biology Society of Japan, Fukuoka Japan, Dec.(2019)

## Molecular Changes in Sensory Neurons During Chronic Cutaneous Inflammation

Name: Sotaro OCHIAI

Host Laboratory: Laboratory for Tissue Dynamics

RIKEN Center for Integrative Medical Sciences

Laboratory Head: Takaharu OKADA

The main focus of the research is to investigate how sensory neurons interact and communicate with non-neuronal cells such as immune cells in the context of cutaneous inflammation.

Briefly, sensory neurons were FACS sorted from WT and atopic dermatitis (AD) mice, and were single cell RNA sequenced. Unsupervised clustering analyses showed that sensory neuron subsets can be divided into six subsets. Differentially expressed gene (DEG) analysis revealed that the gene expression pattern in one of the subsets to be greatly different between the WT and AD mice. One of the signature gene for this subset is interleukin-31 receptor alpha (IL-31RA).

Previous publications report IL-31RA expression on sensory neurons, fibroblasts and cultured epithelial cells. IL-31, its cytokine counterpart, is a type 2 cytokine, the levels of which are increased in the serum patients with AD and other pruritic skin disorders, and is produced by activated T lymphocytes of the AD patients. Although, recombinant IL-31 administration has been shown to induce itch and it is speculated it contributes to the exacerbation of cutaneous inflammation, it is unknown whether IL-31 binds to IL-31RA directly on sensory neurons. Hence, in the first portion of the fellowship, I have investigated whether the importance of sensory neuron IL-31RA during cutaneous inflammation.

I generated sensory neuron specific IL-31RA knock-out mice (IL-31RA-LoxP x Nav1.8-Cre) where only the sensory neurons lack the ability to respond to IL-

31. When recombinant IL-31 was administered, these mice did not show scratching behavior, while the control wild-type mice showed a robust acute scratching behavior. Other itch inducing compounds, such as Compound 48/80, oncostatin M and lysophosphatidic acid, induced comparative levels of itch between the knock-out and wild-type mice. Using a chemically inducible AD model (MC903 model), I discovered that the T cells in the skin produces IL-31 around the time skin inflammation developed. I also showed that the number of scratching events was reduce by at least half in the sensory neuron specific IL-31RA knock-out mice compared to the wild-type mice in this model.

I demonstrated the involvement of IL-31RA expressed by sensory neurons in pruritus, leading to novel therapeutic strategies which target neuronal cytokine receptors to treat disorders that are classically categorised as immune diseases.

I am currently searching for other mediators that could harness interaction and communication between neurons and non-neuronal cells during the development of cutaneous inflammation.

### ●Poster Presentations

Ochiai S., Takahashi S., Nakayama M., Shiroguchi K. and Okada T.: "IL-31 induced pruritus is dependent on the expression of IL-31RA by sensory neuron." The 48<sup>th</sup> Annual Meeting of the Japanese Society for Immunology, Hamamatsu, Japan 2019 December 11-13

**mTORC1 シグナルの細胞間不均一性を生み出す仕組みと  
その役割の1細胞光シームレス解析**

**Single-cell Opto-transcriptomics For Deciphering Mechanisms  
And Functions Of mTORC1 Signaling Heterogeneity**

研究者氏名: 小松 直貴 Komatsu Naoki  
受入研究室: 脳神経科学研究センター  
細胞機能探索技術研究チーム  
(所属長 宮脇 敦史)

細胞内シグナル伝達分子の一つ、mTORC1 (mechanistic target of Rapamycin complex 1) は成長因子やアミノ酸をはじめとする多様な入力により活性化し、翻訳や代謝の制御を介して細胞成長や恒常性維持に関わるという最重要の分子である。mTORC1の活性異常は癌や糖尿病といった深刻な病態と深く結びついている。このためmTORC1活性化に関する分子機構の解明が現在急速に進められている。その一方で、mTORC1はどのようにして多様な入力を統合して細胞機能を適切に制御しているのか、その仕組み(原理)は分かっていない。また、mTORC1は生きた細胞や組織で一体どのような時空間パターンで活性化しているのかというmTORC1の活性動態についても、ほとんど分かっていない。そこで本研究ではmTORC1の活性とその表現型の一つである細胞周期について、生きた細胞でこれら2つを同時に可視化すること、細胞周期進行におけるmTORC1活性動態の役割(生物学的意義)を解明すること、さらにmTORC1活性動態を特徴づけている分子機構を同定することの3点を目標としている。

今年度はmTORC1活性と細胞周期の生細胞内可視化系の構築を行った。具体的にはmTORC1の活性を可視化するための自身開発のプロープEevee-S6K, 細胞周期の可視化プロープFucci (CA) および細胞の自動追尾のための核マーカーH2B-BFPの3種類の蛍光プロープを安定的に発現させるためのベクターを構築した。また培養細胞への各種蛍光プロープの安定発現を行った。並行してプロープ発現細胞を長時間培養しつつ、細胞からの蛍光シグナルを相互干渉なく取得する上で必要な、多色蛍光生細胞イメージングのための顕微鏡システムを構築した。さらに取得した画像データについて、細胞を1

細胞ごとに自動追尾し、複数種類の蛍光シグナルを自動定量するための画像解析プログラムを作成した。構築した可視化系を用いてヒト由来癌細胞の一つであるHeLa細胞を10%血清条件(※細胞が活発に分裂する条件である)にて観察したところ、頻繁に分裂する細胞に特徴的なmTORC1活性動態ならびに細胞周期の進行が遅延している細胞に特徴的な活性動態を見出した。今後は癌細胞や正常細胞を含むいくつかの細胞株について、成長因子やアミノ酸がmTORC1活性動態と細胞周期に及ぼす影響を計測する。得られる時系列データの統計解析によりmTORC1活性動態と細胞周期進行との関係性を明らかにしていく。mTORC1活性動態を人為操作し細胞周期との因果関係を直接示すための方法や蛍光イメージングと併用可能な1細胞レベルの遺伝子発現解析の方法についても検討する予定である。

●**口頭発表 Oral Presentations**

小松 直貴: “mTORC1活性動態の細胞周期進行における生物学的意義の解明”, 多次元細胞計測ワークショップ, 和光, 1月(2020)

●**ポスター発表 Poster Presentations**

Komatsu N., Sakaue-Sawano A. and Miyawaki A.: “Unraveling mTORC1 activity dynamics and its biological roles in cell cycle progression”, 2019 ASCB|EMBO Meeting, Washington DC., USA, Dec. (2019)

Komatsu N., Sakaue-Sawano A. and Miyawaki A.: “Unraveling mTORC1 activity dynamics and its biological roles in cell cycle progression”, Resonance-Bio International Symposium, Tokyo, Oct. (2019)

## XIV-040 Ultrasensitive SERS microfluidic chips fabricated by photonic methods

Name: Shi BAI

Host Laboratory: Advanced Laser Processing Research Team

RIKEN Center for Advanced Photonics

Laboratory Head: Koji SUGIOKA

In FY 2019, three-dimensional metal-semiconductor composite nanostructure was fabricated in a closed glass microchannel. The glass microchannel was fabricated by femtosecond laser assisted chemical etching. In order to realize selective metallization, femtosecond laser ablation and subsequent electroless metal plating were used to create copper film in microchannel. We found that since the metal nanoparticles only deposited on rough glass surface, the laser ablated area was coated by metal film by anchor effect. To generate zinc oxide nanowire, continuous wave laser (CW laser) with 405 nm wavelength was used. The sample was put into zinc precursor (containing zinc nitrate) and irradiated by CW laser. The laser beam was focused by a 10X objective lens on copper film in glass microchannel. Because the copper film absorbed the light and transferred the electromagnetic energy to heat, the zinc oxide nanowire was synthesized by laser induced hydrothermal growth. Energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS) was applied to demonstrate that the nanowire was zinc oxide and the morphology was observed by the scanning electron microscope (SEM). In addition, we found that the shape and length of zinc oxide nanowire could be adjusted by laser power and irradiation time. At low laser power, the zinc oxide nanowire became cauliflower-like shape. With increasing laser power, the zinc oxide nanowire was turned to nanotip, nanowire and fusiform shape. By setting the irradiation time, the length of nanowire could be controlled from several hundred nanometers to several micrometers. At last, the silver nanoparticles were decorated on the zinc oxide nanowires. The silver nanoparticles were synthesized by CW laser as well. The zinc oxide nanowire decorated glass microchip was put into silver nitrate and trisodium citrate solution. Since the silver ions absorbed the photon from CW laser, the silver ions were reduced to silver nanoparticle. Because the trisodium citrate acted as the inhibitor, the silver nanoparticles

were not allowed to grow and eventually, their size was limited to several tens of nanometers. The morphology of three-dimensional metal-semiconductor composite nanostructure (Ag nanoparticle/ZnO nanowire) was observed by SEM and this kind of three-dimensional hybrid structure will be used for surface enhanced Raman scattering. Currently, I am studying on the simulation of electric field excited by the three-dimensional hybrid structure. The simulation results can reveal the intensity of electric field and make it easier to understand the surface enhanced Raman scattering as well as how to increase the enhancement factor of surface enhanced Raman scattering.

### ●Publications

#### Original Paper

1. Bai S., Du Y., Wang C., Wu J. and Sugioka K.; Reusable Surface-Enhanced Raman Spectroscopy Substrates Made of Silicon Nanowire Array Coated with Silver Nanoparticles Fabricated by Metal-Assisted Chemical Etching and Photonic Reduction. *Nanomaterials* 9, 1531, (2019).

### ●Oral Presentation

#### Conference

1. Bai S., Serien D., Hu A., Sugioka K.: "Highly sensitive 3D microfluidic SERS chips fabricated by all-femtosecond-laser-processing for real-time sensing" The 8th International Congress on Laser Advanced Materials Processing, Hiroshima Japan 2019, May 21.
2. Bai S., Serien D., Hu A., Sugioka K.: "Highly sensitive 3D microfluidic SERS chips fabricated by all-femtosecond-laser-processing for real-time sensing" The 80th JSAP Autumn Meeting 2019, Sapporo, Japan 2019, September 20.
3. Bai S., Serien D., Obata K., Sugioka K.: "Femtosecond Laser induced Periodic Surface Nanostructure

on Cu-Ag Double Layer inside glass microfluidic channel for Surface Enhanced Raman Scattering” The 67th JSAP Spring Meeting 2020, Tokyo, Japan 2020, March 12.

#### ●Poster Presentation

Conference

1. Bai S., Wu J., Du Y., Sugioka K.: “Reusable SERS Substrate with Ag Nanoparticle Coated Si Nanowire Array Fabricated by MACE and Photonic Reduction

for SERS sensing” The 8th International Congress on Laser Advanced Materials Processing, Hiroshima Japan 2019, May 22.

2. Bai S., Serien D., Obata K., Sugioka K.: “Femtosecond Laser Direct Writing of Periodic Surface Nanostructure on Cu-Ag Double Layers for Surface Enhanced Raman Scattering” The 7<sup>th</sup> RIKEN Center for Advanced Photonic symposium, Wako Japan 2019. December 9.

### XIV-041 Microfluidic Assisted Synthesis of RNAi-based Cancer Nanomedicine

Name: Hei Man LEUNG

Host Laboratory: Nano Medical Engineering Laboratory  
RIKEN Cluster for pioneering Research  
Laboratory Head: Yoshihiro ITO

Encapsulating therapeutic drugs in nanoparticles have potentials in the development of RNAi-based drug delivery system for cancer treatment. However, the lack of understanding of interactions and transport of nanoparticles to tumor site hindered the use of nanomedicine. The objectives of this research are to understand the effect of drug carriers' size and shape on the interaction with cancer; and to design efficient RNAi-based drug delivery systems for cancer therapy. To achieve these objectives, there is a need for a controllable and reproducible fabrication strategy of carriers for drug delivery. Microfluidic assisted synthesis of polymer particles at micro- to nano- scale is currently being developed for controlling the size and shape of nanomaterials. The advantage of using microfluidic approach is the ability to fabricate reproducible and homogeneous micro- or nano-carriers of desired size and shape. Photo-curable gelatin has been synthesized and

used to generate size tunable droplets with microfluidic assisted approach. The effect of flow rate and concentration of gelatin solution have on the particle size was investigated. The results show our microfluidic devices have excellent controlled over the size of gelatin droplets, which agrees with previous literatures. In order to optimize the design of microfluidic devices for production and UV crosslinking of gelatin droplets, high throughput designs have been incorporated to minimize droplet coalescence and improve encapsulation efficiency. The outcomes of this research will advance the current strategy of drug delivery system development with microfluidics, which enables fabrication of homogeneous particles with size and shape tunability. Furthermore, it is expected that the formations of drug carriers with various shapes can be achieved by adding microfeatures into the microfluidic device.

## XIV-042 Characterization of Dry-Cured Sausages Stuffed in A New Innovative Casing Formulation Based on Terahertz Spectroscopy and Imaging

Name: Chao-Hui FENG

Host Laboratory: Terahertz Sensing and Imaging Research Team

RIKEN Centre for Advanced Photonics

Laboratory Head: Chiko OTANI

Sausages, with the unique flavor and special “bite”, are important gastronomic and nutritional heritage. Natural casings are preferable for sausage manufacture due to its special tender. However, the occurrence of casing burst hinders rapid and efficient sausage production. Therefore, improving the property of the casing is highly requested. In my previous research study, I am the first person to modify a unique natural hog casing by using different concentrations of surfactant solutions and slush salt with lactic acid. Casings were observed to be more porous after modification. Nevertheless, research study on how other sausage casings like sheep and beef casings respond to the casing modification procedures have not been investigated.

Hyperspectral imaging (HSI), as an innovative technology, can simultaneously obtain both spatial and spectral information from a subject. It is a novel method to assess meat quality in the modern meat industry without destructing to the meat products. The application can achieve from to classify the cooked, sliced turkey ham; to predict the quality, chemical composition, microbial contaminants of beef, chicken, pork, fish, and shrimp; to detect the fresh or stale chicken or fish; and to discriminate the adulteration in minced lamb patties. However, there are a few studies addressing on identifying processed meat products using both HSI and terahertz spectroscopy technology (THz).

With the dramatic development of source and detector components, THz technology has recently shown a renaissance in various fields such as medical material, biosensing and pharmaceutical industry. As a rapid and non-invasive technology, it has been intensively employed to detect biology threats and defects, residue detection, transgenic food, foreign body detection, moisture content monitor, dynamical changes in seeds and adulteration. However, the application of terahertz spectroscopy in foodstuffs is still at infant stage in com-

parison with the sophisticated and prevalent spectroscopic and imaging techniques like hyperspectral imaging, Raman spectroscopy, and NIR images. This is because water is strong THz wave absorber, which is the major hurdle for comprehensive application of THz in the food industry. As a high-water content product like casing, it is therefore a great challenge and no relevant study on characterising different casings by using THz spectroscopy has been investigated. Therefore, the main objective of this project is to study the feasibility of characterising different natural casings before and after modification using THz-TDS, to potentially broaden the application fields of terahertz spectroscopy to food field. Following this, the dynamic changes of quality (moisture, color, textural)/microbial attributes in modified casing sausages are creatively to inspect and locate by terahertz spectroscopy and images. The overall results obtained from THz spectroscopy and HSI will be compared.

### ● Publications

#### Papers

1. Feng, C. H. and Makino, Y. (2020).: Colour analysis in sausages stuffed in modified casings with different storage days using hyperspectral imaging - A feasibility study. *Food. Control.* *111*, 107047. Published\* (impact factor: 4.258).
2. García-Martín, J. F., Ruiz, J. C., García, M. T., Feng, C. H. and Mateos, P. A. (2020).: Esterification of free fatty acids with glycerol within the biodiesel production framework. *Processes.* *7*, 1-10. Published\* (impact factor: 2.753).

#### Review articles

1. Feng, C. H. and Otani, C. (2020).: Terahertz Spectroscopy Technology as an Innovative Technique for Food: Current State-of-the-Art Research Advances. *Crit. Rev. Food Sci.* in press. Published.\* (impact

factor: 7.862).

Other

1. Feng, C. H. (2020).: Where there is a will, there is a way. Young Researcher News. 30, 2-4. Published.

#### ●Oral Presentations

Conferences

1. Feng, C. H. and Otani, C.: “Hyperspectral imaging and Terahertz Spectroscopic Imaging Technology as

the Novel Techniques for Food” The All-Riken Workshop 2019. Wako Japan 2019, December 5-6.

#### ●Poster Presentations

Conferences

1. Feng, C. H. and Otani, C.: “Hyperspectral imaging and Terahertz Spectroscopic Imaging Technology as the Novel Techniques for Food” The All-Riken Workshop 2019. Wako Japan 2019, December 5-6.

XIV-043

### 真空の非線形光学の探索へ向けた X線自由電子レーザー極限集光技術の確立

#### Development of single-nanometer focusing system of X-ray free electron lasers for exploring photon-vacuum interaction

研究者氏名: 山田 純平 Jumpei Yamada  
受入研究室: 放射光科学研究センター  
XFEL研究開発部門  
ビームライン研究開発グループ  
(所属長 矢橋 牧名)

本研究の目的は SPring-8 compact free-electron laser (SACLA) により供給される X線自由電子レーザー (XFEL) を径 10 nm 以下まで集光することで、ピークパワー  $10^{22}$  W/cm<sup>2</sup> に到達する超高密度 X線光子場を形成し、これにより真空の非線形光学事象の探求を目指すものである。世界でも未だ報告例の無い XFEL sub-10 nm 集光のための光学系には、楕円凹面鏡・双曲凸面鏡の組み合わせから構成される advanced KB-Wolter III 型光学系を採用し、SACLA というコンパクトな施設においても sub-10 nm 集光が達成可能な 6000 倍以上の大縮小倍率、およびコマ収差補正による 1 arcmin 以上の大きな入射角誤差許容度、の実現を見込んでいる。

研究初年度である本年は、① advanced KB-Wolter III 型光学系の開発と原理実証、② ナノ集光 XFEL の波面計測および配置調整手順の定量化、③ X線プリズムとの組み合わせによるナノ集光ナノ精度ビームスキャン法の開発、に関して研究を行なった。

① について、光学系の設計、シミュレーション検討をつぶさに行ない、構成要素である 4 枚の高精度 X線ミラーと配置調整機構の開発および評価を行なった。本光学系に求められる表面の形状精度は約

1 nm PV (原子層数個分) となり、最先端の精密加工・計測技術をもってしても要求精度を満たすことが難しい。これに対し、X線格子干渉計と差分成膜技術の組み合わせによる At-wavelength 波面補正法を適用することで、従来の限界精度を超える 0.8 nm PV (X線波面誤差で  $\lambda/4$ ) 精度の X線ミラーの作製に成功した。

② について、SACLA に常設されている  $100 \times 200$  nm<sup>2</sup> 集光光学系の波面を格子干渉計により計測し、配置調整誤差により生じるコマ収差を定量化した。計測では系統誤差成分を精査し、特に X線検出器由来の系統誤差を独自手法にて較正した。結果として、集光光学系を波面誤差  $\lambda/16$  以下で調整することに成功し、従来法による集光径評価とも矛盾のない結果を得た。本手法は、広い波長範囲においても適用可能な光学設計としており、現在、定量化した配置誤差量を基にした  $100 \times 200$  nm<sup>2</sup> 集光自動調整システムを構築中である。

③ について、屈折型光学素子である X線プリズムが、入射 X線軌道を 0.1  $\mu$ rad 以下の精度で走査可能である点に着目し、advanced KB 集光光学系との組み合わせによるナノビーム走査手法の実証を行なった。半値幅 50 nm の X線ビームをプリズムによりスキャ



ンすることで、試料を動かすことなく、X線テストチャートの50 nm線幅を解像する透過像の取得に成功した。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

S. Matsuyama, J. Yamada, Y. Kohmura, M. Yambashi, T. Ishikawa, and K. Yamauchi: “Full-field X-ray fluorescence microscope based on total-reflection advanced Kirkpatrick-Baez mirror optics”, *Optics Express* 27(13), 18318-18328 (2019).\*

J. Yamada, S. Matsuyama, R. Hirose, Y. Takeda, Y. Kohmura, M. Yabashi, K. Omote, T. Ishikawa, and K. Yamauchi: “Compact full-field microscope for hard X-rays based on advanced Kirkpatrick-Baez mirrors”, *Optica*, accepted for publication.\*

#### ●口頭発表 Oral presentations

(国際会議)

J. Yamada (invited), S. Matsuyama, T. Inoue, N. Nakamura, T. Osaka, I. Inoue, Y. Inubushi, K. Tono, H. Yumoto, T. Koyama, H. Ohashi, T. Ishikawa, K. Yamauchi, and M. Yabashi: “Development of XFEL sub-10 nm focusing mirrors: wavefront-corrected multilayer KB system and upgrade to advanced KB system”, RIAO-OPTILAS-MOPM 2019, X-ray optics Owe\_3.4, Cancun, Mexico, 23-27th Sept. (2019).

J. Yamada (invited): “XFEL sub-10 nm focusing mirror system based on Wolter III-advanced KB optics”, The 15th Symposium of Japanese Research Community on X-ray Imaging Optics (XIO2019), Sendai, Japan, 25-26th Oct. (2019).

J. Yamada: “Advanced KB mirror optics and its applications”, The 12th 3-Way X-ray Optics Workshop, ESRF, Grenoble, France, 10th Feb. (2020).

(国内会議)

山田純平, 井上伊知郎, 大坂泰斗, 松山智至, 山内和人, 矢橋牧名: “プリズム及びミラー光学素子を用いたマイクロ・ナノ集光X線のビームスキャンニング”, 第33回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 6D002, ウィンクあいち, 愛知, 1月10-12日 (2020).

#### ●口頭発表 Poster Presentation

(国際会議)

J. Yamada, S. Matsuyama, T. Inoue, N. Nakamura, T. Osaka, I. Inoue, Y. Inubushi, K. Tono, H. Yumoto, T. Koyama, H. Ohashi, T. Ishikawa, K. Yamauchi, and M. Yabashi: “Development of XFEL sub-10nm focusing system based on Wolter III-advanced KB optics”, International Conference on X-ray Optics and Applications (XOPT2019), XOPT-P-09, Pacifico Yokohama, Kanagawa, Japan, 23-25th April (2019).

### XIV-044 スーパーキラル光を用いたキラル光クロマトグラフィーの開発 Development of chiral optical chromatography using superchiral light

研究者氏名: 橋谷田 俊 Hashiyada, Shun  
受入研究室: 光量子工学研究センター  
フォトン操作機能研究チーム  
(所属長 田中 拓男)

本研究の目的は、光照射した金属ナノ構造がその近傍に発生するスーパーキラル光を用いて、キラル分子の2つの異性体（エナンチオマー）を空間的に分離する手法「キラル光クロマトグラフィー」を開発することである。エナンチオマーの片方は薬になるがもう片方は毒になる、というようにエナンチオマーの生物学的性質は異なることがあり、エナンチオマーを分離することは重要である。光を用いたエ

ナンチオマー分離は、原理的にはキラルな光である円偏光がキラル分子に及ぼす力（キラル光圧）を用いれば実現可能だが、円偏光とキラル分子の相互作用が弱いことに起因してキラル光圧も弱く、未だ実現されていない。そこで私は、円偏光よりも強くキラル分子と相互作用するスーパーキラル光を用いれば、強いキラル光圧を生成でき、エナンチオマー分離を達成できるのではないかと考えた。この仮説を

実証するためには、まずスーパーキラル光の特性を評価する必要がある。スーパーキラル光は金属ナノ構造周辺の数10nmという極めて小さい領域にのみ発生するため、その観測には光の回折限界を越えた高い空間分解能を有する近接場光学顕微鏡が必須である。本研究では、光捕捉したナノ粒子をプローブとして用いた近接場光学顕微鏡を開発する。プローブ粒子をスーパーキラル光と相互作用させることでスーパーキラル光を散乱し、その散乱光を計測することでスーパーキラル光の空間構造の可視化やキラル光圧の計測を試みる。本年度は、ナノ粒子の光捕捉に用いる光学顕微鏡を自作し、またプローブとして用いる球状金ナノ粒子およびキラルな形状の金ナノ粒子の光散乱特性を調べた。その結果、3次元で等方的なキラリティのない球状金ナノ粒子にキラリティのない直線偏光を照射すると、特定の方向にキラルな楕円偏光（円偏光度： $\pm 40\%$ ）を散乱することを実験で見出し、またナノ粒子の近傍ではスーパーキラル光が発生することを理論計算で明らかにした。これらの成果は、より強くキラル分子と相互作用するスーパーキラル光を創出するための基礎的な知見を与えるものと期待される。

#### ●誌上発表 Publications

(原著論文)

- [1] Hashiyada S. †, Endo K., Narushima T., Togawa Y. and Okamoto H. †: “Spectral properties of chiral electromagnetic near fields created by chiral plasmonic nanostructures“, *J. Phys.: Conf. Ser.*, 1220 012050 (2019)\*
- [2] Gilroy C. †, Hashiyada S. †, Endo K., Karimullah A. S., Barron L. D., Okamoto H., Togawa Y. and Kadodwala M. †: “Roles of superchirality and interference in chiral plasmonic biodetection“, *J. Phys. Chem. C*, 123 15195-15203 (2019)\*

† corresponding authors

#### ●口頭発表 Oral Presentations

(国際会議)

- [1] Yoshitake Y., Hashiyada S., Okamoto H. and Togawa Y.: “The response of chiral magnetic order to chi-

ral plasmonic field”, *The International Symposium on Plasmonics and Nano-photonics (iSPN2019)*, Kobe, Japan, Nov. (2019)

- [2] Gilroy C., Hashiyada S., Endo K., Karimullah A. S., Barron L. D., Okamoto H., Togawa Y. and Kadodwala M.: “The roles of ‘superchirality’, optical chirality dissipation and interference in biomolecular detection with chiral plasmonic structures”, *The 10<sup>th</sup> International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META2019)*, Lisbon, Portugal, July (2019)
- [3] Okamoto H., Hashiyada S. and Narushima T.: “Nanoscale imaging and control of chiral optical fields”, *The 10<sup>th</sup> International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT2019)*, Marina Bay Sands, Singapore, June (2019) (Invited)

(国内会議)

- [4] 橋谷田俊, 岡田大諠, 田中拓男: “直線偏光励起した球状金ナノ粒子からの円偏光散乱”, *日本光学会年次学術講演会 Optics & Photonics Japan 2019*, 大阪, 12月 (2019)

#### ●ポスター発表 Poster Presentations

(国際会議)

- [1] Hashiyada S., Narushima T. and Okamoto H.: “Chiral optical near-field created by plasmonic nanostructures“, *Material Research Meeting 2019*, Yokohama, Japan, Dec. (2019)
- [2] Ahn H. -Y., Hashiyada S., Narushima T., Lee H. -E., Nam K. T. and Okamoto H.: “Plasmonic chiroptical responses of 3D continuous chiral nanoparticles“, *Material Research Meeting 2019*, Yokohama, Japan, Dec. (2019)

(国内会議)

- [3] 橋谷田俊, 田中拓男: “直線偏光励起した球状金ナノ粒子からの円偏光放射”, *理研シンポジウム: 第7回「光量子工学研究」*, 和光, 12月 (2019)
- [4] 吉武侑耶, 橋谷田俊, 岡本裕巳, 戸川欣彦: “キラルプラズモンによる磁気秩序の応答”, *日本物理学会2019年秋季大会*, 岐阜, 9月 (2019)

## XIV-045 Tip-Enhanced Raman Spectroscopy of Homogeneous Displacement of Aromatic Thiolates for Binary Self-Assembled Monolayers on Au(111)

Name: Misun HONG

Host Laboratory: Surface and Interface Science Laboratory

RIKEN Cluster for Pioneering Research

Laboratory Head: Yousoo KIM

Tip-enhanced Raman spectroscopy (TERS) based on scanning tunneling microscopy (STM) has attracted great attention to spatially resolve chemical information as well as topographic features of molecules in local regions at various interfaces. Here, molecular exchange reactions (i.e. displacement) are investigated for thiolate self-assembled monolayers (SAM) on Au(111) by STM-TERS analysis. Displacement approach has been applied for fabricating binary SAMs to render surface properties and physical/chemical behaviors. One adsorbate molecules are first introduced to fully cover surface of a substrate, which is followed by exposure to the other adsorbate molecules to displace the pre-adsorbed species. The resultant binary SAMs can exhibit homogeneous blending of two components or phase segregation into each component-rich domains depending on combination of adsorbates, intermolecular interactions during fabrication, and so on.

Among SAMs on gold surfaces, aromatic thiolates such as benzenethiolate and its derivatives have been investigated for both fundamental understanding of SAMs using Raman spectroscopy and practical functions of electron conduction across the films applicable in organic devices. In this work, two types of simple aromatic thiolates, benzenethiol and benzenemethanethiol, were co-adsorbed on Au(111) with progressively increasing reaction time for displacement. Upon displacement, surface concentrations of the displacing thiolates became predominant as proven by vibrational features in TERS spectra. On the other hands, surface topography of SAMs obtained by STM imaging could represent the underlying Au(111) surfaces. Even after the binary SAM was overwhelmingly composed of the

displacing thiolates, the Au surface structures partially remained as similar as when covered with the pre-adsorbed thiolates. These complementary analyses of TERS and STM could suggest kinetically facile exchange of pre-adsorbed species with new adsorbates and rather slow diffusion of underlying surface Au atoms during displacement. Furthermore, displacement occurred homogeneously at least in nanometer scale as TERS measurements at multiple local sites on one sample showed resembling vibrational features in the spectra. This again supports facile displacement reaction of the simple aromatic thiolate SAMs on Au(111). The achievement in here demonstrates advantages of TERS and STM analyses demonstrating structural and chemical states of molecules at interfaces more than surface morphologies.

### ● Oral Presentations

Conferences

Hong M., Yokota Y. Hayazawa N., Kazuma E., Kim Y.: "Development of EC-TERS towards spatial spectroscopy of electrochemical interfaces" ECSJ Fall Meeting, Yamanashi Japan 2019, September 5-6.

### ● Poster Presentations

Conferences

Hong M., Yokota Y. Hayazawa N., Kazuma E., Kim Y.: "Tip-enhanced Raman spectroscopy of aromatic thiol self-assembled monolayers on Au(111)" 27th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM27), Shizuoka Japan 2019, December 5-7.

## XIV-046 Development of a Hybrid Scanning Probe-Fluidic Nanospectroscopy System for In-Situ Molecular Bioanalysis

Name: Maria Vanessa BALOIS

Host Laboratory: Innovative Photon Manipulation Research Team

RIKEN Center for Advanced Photonics

Laboratory Head: Takuo TANAKA

Recently, we were able demonstrate subnanometer resolution imaging in ambient using our home-built scanning tunneling microscope (STM) based tip-enhanced Raman scattering (TERS) spectroscopy system. Such high spatial resolution was obtained owing to the high photon confinement of light at the tip apex, the stable environment of the experiment system, and our highly defined test sample, which is a membrane of pristine monolayer graphene on an Au(111) single crystal substrate. Our current work focuses on: (1) the evidence of high photon confinement through the simultaneous observation of both allowed and forbidden Raman modes of graphene; (2) characterization of local strain variations in graphene on an Au(111) substrate; and (3) the possible effect of high photon confinement on the strain analysis of graphene.

An important evidence of the strongly confined field at the tip apex is the observation of the forbidden  $D$ ,  $D'$ , and  $D+D'$  Raman modes alongside the allowed  $G$  and  $2D$  Raman modes. The forbidden modes are called “forbidden” under diffraction-limited excitation because there are no defects to preserve the momentum conservation by electron-phonon scattering during double resonance. During TERS excitation of pristine or “defect-free” graphene, however, large  $k$  vectors are present and can conserve the momentum through possibly non-vertical optical transitions. In our STM-TERS system, the large wavenumber is determined by the inverse of the field variation distance,  $k_{\text{NF}} \sim p/d \sim 10^7 \text{ cm}^{-1}$ . This value almost spans the wavevector  $q$  of the full phonon dispersion curve that reaches up to the boundary of the Brillouin zone, whose value is  $p/a \sim 10^8 \text{ cm}^{-1}$ , where  $a$  is the lattice parameter. Therefore, momentum is conserved not only for the  $D$  and  $D'$  Raman modes, but even the  $D+D'$  combination mode. Hence, enabling all three forbidden modes to be detectable. This kind of breaking of Raman selection rules

would not occur if the field is not strongly confined.

Using our high resolution STM-TERS system in ambient, we were able to study the as-fabricated strain properties of a monolayer graphene membrane on an Au(111) substrate. In particular, we successfully imaged local strain nano-domains that could not be directly imaged through conventional Raman microscopes. We also observed splitting of both the  $G$  and  $D'$  Raman modes due to uniaxial strain. However, through the comparison of the theoretically calculated strain and the experimentally observed strain, it is possible that other Raman modes are also excited during TERS excitation. This presents an interesting challenge for both theoreticians and experimentalists alike to determine the effects of highly confined light on the measured Raman spectra. Such findings will, in turn, further help in understanding and analyzing TERS acquired data.

### ●Publications

#### Original Paper

Balois M.V., Hayazawa N., Yasuda S., Ikeda K., Yang B., Kazuma E., Yokota Y., Kim Y. and Tanaka T.: Visualization of subnanometric phonon modes in a plasmonic nano-cavity via ambient tip-enhanced Raman spectroscopy. *npj 2D Mater Appl* 3, 38 (2019). published\*

#### Review article

Balois M.V., Hayazawa N., Chen C., Kazuma E., Yokota Y., Kim Y., and Tanaka T.: Development of tip-enhanced Raman spectroscopy based on a scanning tunneling microscope in a controlled ambient environment. *Japanese Journal of Applied Physics*, 58, SI0801 (2019). published\*

### ●Oral Presentations

#### Conferences

Balois M.V., Hayazawa N., and Tanaka T.: “Sub-nano-

meter Resolution Tip-Enhanced Raman Spectroscopy in Ambient” The International Symposium on Plasmonics and Nanophotonics” Kobe, Japan, November 11-14 (2019).

Balois M.V., Hayazawa N., and Tanaka T.: “Sub-nanometer Resolution Near-Field Scanning Optical Microscopy in Ambient” The 3<sup>rd</sup> RIKEN-nCOMS Joint Symposium, Wako, Japan, August 19 (2019).

#### ●Poster Presentations

Conferences

Balois M.V., Hayazawa N., and Tanaka T.: “Sub-nanometer Resolution Near-Field Scanning Optical Microscopy in Ambient” The 7<sup>th</sup> RIKEN Center for Advanced Photonics Symposium, Wako, Japan, December 9-10 (2019).

Balois M.V., Hayazawa N., and Tanaka T.: “Sub-nanometer Resolution Near-Field Scanning Optical Microscopy in Ambient” 国際光デーシンプジウム 2019, Tokyo, Japan, June 28 (2019).

XIV-047

### 非侵襲脳刺激により解明する脳波同期の機能的役割 A Non-invasive Brain Stimulation Approach for Revealing the Roles of Neural Synchronization

研究者氏名: 小野島隆之 Takayuki Onojima  
受入研究室: 脳神経科学研究センター  
理研-CBS トヨタ連携センター  
脳リズム情報処理連携ユニット  
(所属長 北城 圭一)

脳内では周期的な神経活動が存在しており、ヒトでは頭皮脳波として観測することが可能である。この周期的な脳活動は異なる脳領域間、または、音声、視覚刺激などの外部刺激と同期することが知られており、この同期現象が脳の高次機能を実現しているのではないかと考えられている。本研究の目的は、この同期現象が起きる機序と脳機能の役割を解明することである。そのために、脳波の同期現象を説明するモデルの推定と、経頭蓋磁気刺激 (TMS) などの非侵襲脳刺激を用いて脳波間の同期を阻害する実験を実施する。

本年度は、手法の開発と、経頭蓋磁気刺激法を用いた脳波計測実験 (TMS-EEG) の準備に重点を置いて研究を遂行した。研究手法の開発では、既存の実験データと数値シミュレーションで得られたデータを用いて、刺激に対する脳波位相の応答を検出する方法を検討した。また、リアルタイムでの脳波位相の状態をもとに磁気刺激を与える Closed-loop TMS-EEG を実施するためのシステムの構築とそれ

をテストするための枠組みを構築した。実験の準備では、TMS-EEG の前段階として、磁気刺激ではなく視覚刺激を与えたときの脳波計測実験を実施した。視覚刺激を用いることで、視覚に関する脳機能と脳波位相の応答との関係を検証することが可能となる。また来年度以降に実施予定の磁気刺激を与える実験の場合と比較することで、より詳細に脳波と脳機能の関係を検証できる可能性がある。現在はこのデータの解析を実施している。

#### ●ポスター発表 Poster Presentation

(学会)

Onojima T., Okazaki Y. and Kitajo K., A model-based approach to estimating phase response curves of TMS modulated EEG oscillations, Annual Meeting of the Organization for Human Brain Mapping, Auditorium Parco Della Musica, Rome, Italy, Jun. (2019)

**XIV-048 室温で電子スピン操作可能なカーボンナノチューブ単一量子源の実現**  
**Single Quantum Source Capable of Manipulating Electron Spin**  
**at Room Temperature Based on Carbon Nanotubes**

研究者氏名:小澤大知 Daichi Kozawa  
受入研究室:光量子工学研究センター  
量子オプトエレクトロニクス研究チーム  
(所属長 加藤 雄一郎)

次世代の情報通信・処理技術として、電子スピンや光子などの量子を用いたシステムの発展が望まれている。長距離間で量子情報のやり取りをするためには、発生する光子が通信波長であることが求められる。それだけでなく、光子の量子情報を保存するために電子スピンに情報を転写できることが必要である。また実用性の観点から室温で動作することが望ましい。これらの動作をする量子素子をSiウエハ上に密に敷き詰めて、光の導波路を配線として利用すれば光で動作する“量子”集積回路の実現となる。本年度はカーボンナノチューブに官能基を共有結合で化学修飾することで、スピン操作可能な構造を作ることを目的とした。後に集光したレーザーで局所的に化学修飾を行うことを見据えて、ここでも光化学反応により、カーボンナノチューブ (CNT) に化学修飾して、発光中心となる欠陥構造を導入した。CNTをSi基板の溝上に架橋させたものに前駆体のガスを流し、そこにレーザー照射した。

我々はすでに化学修飾した架橋ナノチューブの作製および、その発光中心からの発光の観測に成功している。また多数のカイラリティのナノチューブの発光スペクトルデータを収集するための自動化をすでに進めている。これまで約1000本のナノチューブにおいて、発光中心の発光を観測し、解析プログラムを書いて統計的に解析した。ただしカイラリティとはグラフェンシートを巻く角度・直径の違いのことで、これによりバンドギャップの大きさが決まる。興味深い点として、カイラリティの違いにより、ナノチューブとガスの反応性に違いが出てくることがわかった。

これまでの成果をもとに今後は、1: 欠陥構造の導入のための光化学反応制御、2: 精密に位置制御された欠陥構造の導入、3: 欠陥構造における電子スピンの操作、読み出しへと研究を進展させていく予定である。1と2によりSiウエハ上の好きな場所に好きな個数だけ量子源を配置できるようになり、回路の集積化につながる。3が室温で実現すれば、通信波長帯、室温で動作する理想的な量子メモリが実現につながる。また、この量子システムはCNTというナノ配線が接続された単一スピンで構成され、量子ドットやNVセンターでは作製が困難なデバイスが自然と実現する。電気的なスピン状態制御の可能性も新たな展開が予想される。

●**口頭発表 Oral Presentations**

Daichi K., Xiaojian W., Akihiro I., Jacob F., Keigo O., Rong X., Taiki I., Shigeo M., YuHuang W., Yuichiro K. K., “Diameter-dependent Photoluminescence Energy Observed in Color Centers of Air-Suspended Single-Walled Carbon Nanotubes”, 第67回応用物理学会春季学術講演会, 上智大学四谷キャンパス, 3月 (2020)

Daichi K., Xiaojian W., Akihiro I., Jacob F., Keigo O., Rong X., Taiki I., Shigeo M., YuHuang W., Yuichiro K. K., “Vapor-Phase Functionalization of Air-Suspended Single-Walled Carbon Nanotubes Using an Aryl-Halide”, 第58回 フラワーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 東京大学 伊藤国際学術研究センター 伊藤謝恩ホール3月 (2020)

## On the evolutionary mechanism of the establishment of dinosaur body plan

研究者氏名: 江川 史朗 Shiro Egawa

受入研究室: 生命機能科学センター

形態進化研究チーム

(所属長 倉谷 滋)

主竜類（鱷や恐竜）のボディプランの進化は腰や後肢の骨格形態の特殊化によって特徴づけられ、これにより後肢の機能性が向上して生態学的な成功を収めたことが示唆されています。腰や後肢の形態学的特殊化に関して、進化的変遷の古生物学的記載は豊富にあるものの、「なぜ主竜類は主竜類独自の形態を獲得できたのか」という視点から行われた研究は多くありません。この問いに答えるためには、形態進化の取りうる道筋を「機能」と「発生（形態形成）」で説明をつける必要がありますが、特に発生（形態形成）の観点からアプローチしている研究はほぼ皆無です。本研究では後者の視点に立ち、胚と化石を解析することで彼らの形態進化メカニズムを明らかにし、上記の問いへの回答を試みます。

発生学的アプローチ（胚）では、骨格の形態形成が筋肉系の発生と密接な相互作用を持つ点に着目し、このメカニズムに基づいて主竜類の後肢骨格形態が獲得されてきたという仮説の検証を試みます。比較形態学的アプローチ（化石）では、アダルトの骨格形態のヴァリエーションとその表出の様式を記載します。それにより、その系統の進化可能性（進化しやすい方向性）の傾向を引き出し、原始的な主竜類（およびその祖先）は主竜類の特殊形態を進化させやすいような傾向があったのかどうかの検証を試みます。

主竜類の系統は、当該種・近縁種が多数生存しており（蜥蜴・亀・鱷・鳥）、化石記録も豊富です。このおかげで、本系統は「数億年の間に発生（形態形成）がどのように変遷してきたのか」を最も詳細に復元できる脊椎動物分類群です。また、後肢はほ

ぼ純粋な運動器官であり、恐竜をはじめとする2足歩行の動物にとっては唯一のメインの運動器官でもあります。このことから、主竜類の後肢の進化を吟味することで「発生と機能がどのように折り合わさって形態進化の道筋にバイアスを与えているのか」が最も明瞭に見えてくると期待できます。これらの利点を活かし、「形態進化の歴史的変遷」に対して新しい認識の視座を提示することを目標としています。

## ●口頭発表 Oral Presentations

- Egawa, S., Botelho, J., Bhullar, B.A.S. 主竜類における大腿骨の形態形成の進化史の復元 (The reconstruction of the evolutionary history of femoral morphogenesis in archosaur). 第52回日本発生生物学会年会, 大阪, 2019.05
- Egawa, S., Botelho, J., Bhullar, B.A.S. On the Morphogenetic Historiography of the Archosaur Femur. International Congress of Vertebrate Morphology12, Prague Czech Republic, 2019.07
- 江川史朗. 恐竜の股関節における発生システム浮動. 第7回形態進化発生コロキウム, 東京, 2019.12

## ●ポスター発表 Poster Presentation

- 江川史朗, Joao F. Botelho, 倉谷滋, John R. Hutchinson, Bhart-Anjan S. Bhullar. ワニと恐竜の大腿骨頭は相同だが、恐竜と鳥の大腿骨頭は相同ではない. 日本古生物学会 2020年例会, 東京, 2020.02





## 2019-20 基礎科学特別研究員年報

---

令和2年9月30日 印刷

令和2年9月30日 発行

編集兼 国立研究開発法人理化学研究所

発行者 人事部 研究人事課

〒351-0198 埼玉県和光市広沢2番1号

---

# 2019-20

Special Postdoctoral Researcher Program  
2019-20 Annual Report

基礎科学特別研究員年報