

第 58 回 分子科学若手の会夏の学校

サーキュラー 1 号

平成 30 年 4 月 3 日

発行：分子科学若手の会 夏の学校事務局

1 分子科学若手の会 夏の学校のおさそい

分子科学若手の会 夏の学校事務局より、『第 58 回分子科学若手の会 夏の学校』のご案内を差し上げます。私どもは、昨年 9 月より新たな顔ぶれにて夏の学校の準備を進めております。

今年度もまた、分子科学若手の会 夏の学校の季節が近づいて参りました。本サーキュラーでは第 58 回 分子科学若手の会夏の学校の概要のみをお知らせし、詳細はサーキュラー第 2 号 (5 月上旬配信予定) および Web サイト (<http://www.ymsa.jp/>) にて改めてお知らせいたします。

分子科学若手の会 夏の学校では、第 1 回の開催当初から変わらず、最先端の研究課題について時間をかけて、体系的に学ぶことを重視して「集中講義・議論」の形式をとっています。近年では 5 つの分科会に分かれ、それぞれの設定テーマについて活動することとしております。

今年度も最先端でご活躍されている先生方をお招きして、分子科学に関する以下の分科会を設けました。

- 第一分科会 佐甲徳栄 先生 (日本大学)
『分子科学における代数理論:振動ダイナミクスへの応用を中心に』
- 第二分科会 西澤宏晃 先生 (分子科学研究所)
『大規模分子の凝集シミュレーション計算手法』
- 第三分科会 森健彦 先生 (東京工業大学)
『有機伝導体・有機エレクトロニクスのための物理化学』
- 第四分科会 中林孝和 先生 (東北大学)
『分子・スペクトルの外部電場効果:基礎から生体分子、細胞まで』
- 第五分科会 竹内佐年 先生 (兵庫県立大学)
『非線形分光の基礎と超高速分子ダイナミクス研究への応用』

毎年参加されている研究室はもちろんのこと、しばらく遠ざかっていた研究室、また今回が初めてという研究室の方も、ぜひ奮ってご参加ください。

2 分子科学若手の会 夏の学校 概要

「分子科学若手の会」とは、実験・理論を問わず分子科学に関心を持つ、若手研究者・大学院生からなる集まりです。この会は、若手研究者の交流の機会を設け、研究活動の推進と発展に資することを目的として活動し、合宿形式での勉強会を開催しています。1961年に始まり、今年で第58回目をむかえるこの勉強会を「分子科学若手の会 夏の学校」と呼びます。

夏の学校では、全国の大学・研究機関から若手研究者が集まります。参加者のほとんどは大学院生ですが、分子科学の研究者はもちろん、近年では生命科学・物性物理学を研究する方の参加も増え、多様性のある会となってきました。

夏の学校では、主として以下の活動を行います。

分科会

夏の学校の参加者は5つの分科会のうちの1つを選択してその講義を受けます。講師の先生方の趣向に応じて最先端の内容を踏まえた講義や、基礎的な内容をみっちり扱う講義など様々な形式があります。講師の先生と聴講する学生の双方で作り上げていく形になることも多く、夏の学校の代表的な行事といえます。

懇親会・ポスターセッション・レクリエーションなど

講義だけでなく、集まったからこそできる交流もあるはずです。毎晩開かれる懇親会は、全国各地から集まった参加者同士の親睦を深める貴重な機会であり、分子科学の研究者を志す仲間を作る絶好のチャンスでもあります。参加者によるポスター発表（任意）の時間も設けているので、他の参加者がどのような研究を行っているのかを聞き、研究内容の議論を行うことができます。学会と異なり、若手を中心とした場での自由闊達な議論が行える点が特徴的といえます。

講師の方のフリートーク

講師の方のフリートークでは、普段の研究生活や、海外留学、人生設計から趣味の話題まで、講師の方々に自由に語って頂いております。また、参加者の方々に寄せられた質問に対しても、講師の方々にざっくばらんに答えていただきます。分科会で聴ける学術的内容以外のことを講師の方々に訊くチャンスです。

参加者は、さまざまな知識・知恵を吸収することができるでしょう。そして、夏の学校は若手研究者同士の議論・交流を深める場としての意義も持っています。

分子科学について深く考え、議論を戦わせ、そしてこの分野の将来を熱く語り合う、それが分子科学若手の会 夏の学校なのです！

3 夏の学校 開催案内

日程	2018年8月20日（月） - 24日（金）
会場	ふじのくに千本松フォーラム「プラザ ヴェルデ」 （静岡県沼津市大手町一丁目1番4号） http://www.plazaverde.jp/index.html
宿	(8/20-23) ココチホテル沼津 （静岡県沼津市高島町1-12） http://www.cocochee.jp/ HOTEL MIWA （静岡県沼津市高島町7-2） https://www.hotelmiwa.jp/
	(8/23-24) 伊豆長岡温泉 三楽の宿 さかや （静岡県伊豆の国市長岡78） http://www.sakaya.net/

4 参加登録

参加登録は Web サイトにて受け付ける予定です。参加登録期間は5月1日(火) - 5月31日(木)の予定です。詳細は後日、サーキュラー2号 および Web サイトにてお知らせいたします。

5 参加費と交通費補助

夏の学校への参加費は、4泊5日（食事つき）で30000円 - 35000円を予定しております。実際の金額は、参加者の人数等によって確定後、お知らせいたします。

また、遠方からの参加者に対して、交通費の補助を行います。詳細はサーキュラー2号 および Web サイトにてお知らせいたします。

6 分科会の紹介

第一分科会

佐甲 徳栄 先生（日本大学 准教授）

題目『分子科学における代数理論:振動ダイナミクスへの応用を中心に』

原子・分子が躍動するミクロの世界では、対称性が重要な役割を演じます。これは、多くの化学系の学科において、数学科においてすら必ずしも必修ではない「群論およびその表現論」がカリキュラムに組み込まれていることから分かります。点群等の空間的な対称性については、分光光学や量子化学計算において古くから多くの応用がなされてきました。一方近年、「系の動力学的な性質」に基づく対称性である dynamical symmetry に関心が集まっています。

身近な例として、水素原子の束縛準位のエネルギー構造を考えてみましょう。水素原子のエネルギー準位はご存知の通り、主量子数 n 、方位量子数 l 、および磁気量子数 m によって指定されます。磁気量子数 m に関する $2m+1$ 個の準位は外場が無視できる場合は縮重し、この縮重は空間の等方性を考えることによって自然に理解できます。一方、水素原子では同じ主量子数 n に属する異なる軌道角運動量 l の状態（例えば、 $(2s, 2p)$ や $(3s, 3p, 3d)$ など）も全て縮重しています。異なる軌道角運動量を持つ状態が同じエネルギーを持つ物理化学的理由は何でしょうか。この水素原子における特異な縮重は「クーロン縮重」と呼ばれており、dynamical symmetry の一例です。すなわち、空間的な対称性ではなく、電子-核引力がクーロン力であることに起因する、系の動力学的性質に由来する縮重になります。

系が何らかの対称性を持つ場合には、そのエネルギー準位には縮重が現れます。この縮重を持つ特徴的なエネルギー準位構造は、分光光学における状態の帰属に役立つだけでなく、その量子系を支配する力の法則や、さらには、「系がどのような運動をしているのか」という動力学的な情報を与えてくれます。本分科会では、dynamical symmetry の応用として、特に原子核の複雑なエネルギー準位構造の解析から生まれた「代数アプローチ」と呼ばれる理論に着目し、多原子分子の振動や化学反応への応用を基礎から学んでいきます。

担当：久賀谷 有人（慶應義塾大学 数下研究室 M1）

第一分科会では、日本大学の佐甲徳栄准教授をお招きし、分子科学における代数理論の基礎、そして振動ダイナミクスを中心に、その応用を講義して頂きます。

代数アプローチとは何でしょうか。量子力学を学んだことがある方は、例えば調和振動子や角運動量の議論において、昇降演算子を見かけたことがあると思います。これを利用すると、微分方程式を直接解かずに、各種行列要素の計算ができたり、ハミルトニアンを表現したりすることができ、非常に有用です。その昇降演算子の特徴づけているのは、演算子の「交換関係」であり、そこには Lie 代数と呼ばれる理論が潜んでいます。これを駆使する方法——つまり、量子力学の根底を支配している代数に注目する方法——が代数アプローチです。

代数アプローチの理論は、有限群よりも増して難解であり、またその応用が分かりやすく書かれた本はなかなかありません。独学することは困難といえるでしょう。ゆえに本分科会は、代数アプローチを基礎からしっかりと学びつつ、それがどのように応用されるのかを知るには絶好の機会です。皆様の参加をお待ちしております。

第二分科会

西澤 宏晃 先生（分子科学研究所 特別研究員）

題目『大規模分子の凝集シミュレーション計算手法』

大規模分子の凝集反応を取り扱う計算手法として、分子力学法に基づいた分子動力学計算が広く用いられます。分子力場計算では残基ごとに原子のパラメーターを設定し、そのパラメーターを用いて原子間の力を計算することで、数万原子を超える分子に対しても高速な計算が可能です。その一方で、パラメーターがシミュレーション中に変化しないため、金属原子を介した凝集などの、化学結合の変化を伴うような反応を取り扱うことはできません。このような反応は、原子間に働く力を量子化学計算により求めることで取り扱うことが可能となります。しかし、通常用いられる Hartree-Fock や DFT などの量子化学計算は計算コストが高く、凝集反応が観測できる程度のシミュレーションは小さい系に対してしか適用できません。

このような系を取り扱うために精度と計算コストのトレードオフから、量子力学(QM)と分子力学(MM)の計算手法を組み合わせた QM/MM 法がしばしば用いられます。この手法では注目したい部分だけを量子化学で取り扱いますが、反応する部位が特定されていないなどの理由で QM 領域が大きくなると、適用が困難になります。そこで、ある程度の精度を保証しつつ低コストで計算可能な QM 理論の利用、オーダーN 理論の適用などを行うことで大規模分子に対しても QM/MM (あるいは QM) 分子動力学計算を行うことが可能となります。

本講義では大規模分子の凝集反応を QM/MM 分子動力学計算で取り扱うための、基礎的な理論について解説します。初めに、本講義で使用する分子動力学法と量子化学計算手法について解説します。その上で、QM/MM 計算、大規模 QM 計算の理論へ展開していきます。時間があれば、これらの理論をより効率的に実行するための、プログラムの作成方法についても解説します。また、例としていくつか計算を行う予定です。こちらでも行いますが、ノートパソコンを持参していただければ実際に計算を体験できると思います。

担当：海老澤 修一（北海道大学 武次研究室 M1）

第二分科会では分子科学研究所の西澤宏晃先生をお招きし、大規模分子の分子動力学計算の理論とその適用についてお話していただきます。

西澤先生は主に大規模系の MD 計算の理論とプログラムの開発をされています。近年は密度汎関数強束縛法 (density-functional tight-binding method) に対し分割統治法 (divide-and-conquer method) を適用した DC-DFTB 法に基づいた計算プログラム DC-DFTB-K の開発など、大規模系の QM 計算が抱える膨大な計算コストの削減に取り組まれています。

今回は大規模分子の凝集反応を題材とし、大規模分子の MD 計算に必要となる QM (quantum mechanics) 計算と MM (molecular mechanics) 計算の基本的な理論についてご解説頂きます。次いで、高精度な QM 計算と低コストな MM 計算を組み合わせた計算手法を用いた (MD 手法である) QM/MM-MD 計算についてご解説頂き、MD 計算に関する理解を深めた上で、QM/MM-MD 計算の応用例や大規模系の QM 計算への理論展開に関するご説明をして頂きます。

MD の理解を深めたいという方、巨大な分子の計算に興味がある方などは専門を問わず、是非ご参加頂ければと思います。

第三分科会

森 健彦 先生 (東京工業大学 教授)

題目『有機伝導体・有機エレクトロニクスのための物理化学』

有機エレクトロニクスの世界で起こっている現象を理解するためには、分子性物質の伝導性について理解する必要があります。本講義では通常は固体物理の言葉で解釈されている事柄を、物質開発の立場から分子科学の言葉で理解し直すことを試みます。

分子性結晶を理解するための出発点はエネルギーバンドですが、有機結晶のエネルギーバンドは無機物よりもむしろ単純明快です。伝導体であればフェルミ面が存在し、もし極低温まで金属的伝導性を保てばフェルミオロジーと呼ばれる手法で実験的に調べることもできます。しかしながら、フェルミ面をもつ物質はすべて金属のはずですが、多くの有機伝導体は半導体になります。金属・半導体転移のような性質を理解するためには電子相関とか電荷整列と呼ばれる現象を考慮する必要があります。要するに電子と電子の間にはクーロン斥力が存在するため、伝導体の物性はエネルギーバンドだけから予想されるのよりもかなり複雑になります。これに関連して磁性や超伝導のような性質も出てきます。

有機半導体には p 型材料と n 型材料がありますが、すべての分子は HOMO と LUMO をもつはずですので、p 型と n 型があるのはおかしな話です。もちろんエネルギーレベルを考えればこうしたことはある程度理解できますが、電極があると有機分子のエネルギーレベルはかなり節操なく変化します。電界効果トランジスタのなかではエネルギーレベルがシフトしたり曲がったりしますが、100 V 近いゲート電圧をかけてもエネルギーレベルのシフトは 1 eV 以下です。有機半導体中のトラップからの熱励起を考慮すればトランジスタ特性の温度依存性を理論的に導き出すこともできます。有機半導体を評価するときを使う移動度は、1 キャリアあたりの伝導度に相当する量ですので、金属伝導に対応する状況では移動度は温度を下げると増加

し、いわゆるバンド伝導が起こります。非常にきれいな有機半導体結晶のなかでは、このような「金属的伝導」が起こることが観測されています。

こうした話題を通して、有機エレクトロニクスの背後で起こっている分子性物質のインtrinsicな伝導性について、これまでに分かっていることを明らかにしていきたいと思えます。

担当：鍋井 庸次（総合研究大学院大学 山本研究室 M1）

第三分科会では、東京工業大学の森健彦教授をお招きし、有機伝導体・有機エレクトロニクスの物理と化学を、基礎から最新の研究まで講義していただきます。森先生は有機トランジスタのための電荷移動錯体、有機半導体の開発や、有機超伝導体の電子状態の研究をされています。加えて、超伝導の理論研究にも精通されています。

有機伝導体・有機エレクトロニクスの分野は、現在、有機合成や物理化学、デバイス工学、理論物理と様々な観点から研究され、非常に興味深い分野へと発展しています。本分科会ではこの分野を、物質開発の立場から理解し、有機物の伝導現象の本質に迫っていきます。基礎から扱っていくため、理論、実験、物理、化学に関わらず有機伝導体・有機エレクトロニクスに興味関心がある方は是非ご参加ください。

第四分科会

中林 孝和 先生（東北大学 教授）

題目『分子・スペクトルの外部電場効果:基礎から生体分子、細胞まで』

外部電場を印加することによって、分子構造の理解から反応・物性・細胞状態の制御までを行うことができます。分子に電場を印加すると、Stark 効果によって吸収および蛍光スペクトルがシフトまたはブロードニングをします。このスペクトル変化を理論解析することによって、電子励起状態の構造情報を得ることができます。さらに、吸収や蛍光強度そのものが変化することがあります。この変化は電場による回転または電子励起状態からの緩和・反応の電場変化に対応し、反応や緩和過程の電場制御・機構の解明へと繋がります。また、赤外吸収スペクトルの電場効果も測定されており、基底状態の分子の会合構造、振動モードの非調和性、さらにタンパク質内にある特定の官能基の極性環境など、他の手法では得ることが難しいユニークな情報が得られています。

これらの電場効果は、気体や溶液、膜、固体といった様々な系で測定されており、各系での分子構造や反応の電場制御を行うことができます。さらにスペクトル変化だけではなく、機能性材料の研究では、電場印加による電荷移動錯体の伝導性の制御、生物の研究では、電場効果による細胞のアポトーシス（細胞死）の効果的誘導、細胞内イオン濃度の変化などが報告されています。

本分科会では、主に生体分子に着目し、電場効果のスペクトル変化の基礎と応用、そしてさらなる展開について、平易に説明します。また、生体分子の分光学のトピックスや、メカノバイオロジーとしてのナノ秒パルス電場を用いた細胞の電場効果についても紹介します。講義は以下の点を考慮しながら進める予定です。

- (1) 式変形を行い、電場効果の背景となる理論について理解できるようにする。
- (2) 電場効果の実験方法、さらに生体分子や細胞の実験方法についても説明し、参加者が研究室に戻ってまたは将来に電場効果や生体分子の実験ができるようにする。
- (3) 生体分子だけではなく、気体、界面および固体の研究者についても、自身の研究と電場効果を組み合わせられるヒントを与えられるようにする。
- (4) 電場効果および生体分子の分光学のトピックスに触れ、今後の展開について検討する。

電場効果を理解したい・研究してみたい、生体分子や細胞の分光に興味がある、また何だかわからないけど興味がある方、ぜひ御参加下さい。

担当：戸田 尚吾（関西学院大学 重藤研究室 D1）

第四分科会では、東北大学の中林孝和先生をお招きし、分子・スペクトルの外部電場効果について基礎から解説していただきます。外部から電場を印加することで物質の構造や機能を制御することができるため、外部電場が引き起こす現象は材料科学や医学の分野へ応用されています。また、生体分子の水和水や電池内部の材料は電場にさらされた環境で機能していることから、そのふるまいを明らかにする上で電場が物質に与える影響の理解が必要不可欠です。そこで本分科会では、外部電場に対する分子の応答を分光学的に観測する基本的な手法から、電場による細胞状態の制御等に関する最新のトピックスまでを学び、外部電場効果に関する理解を深めることを目的とします。物理学的な内容から生物学的な内容まで幅広い知識を得ることができる絶好の機会です。皆様のご参加を心よりお待ちしております。

第五分科会

竹内佐年 先生（兵庫県立大学 教授）

題目『非線形分光の基礎と超高速分子ダイナミクス研究への応用』

1960年にレーザーが発明されて以来、極限をみてみたいという研究者らの好奇心としのぎを削るような努力により、時間幅の短いレーザーパルス光が次々と実現されてきました。今やフェムト秒（ $= 10^{-15}$ 秒）時間領域のパルス光は比較的容易に発生させることができるようになり、研究の最前線ではアト秒（ $= 10^{-18}$ 秒）時間領域のパルス光の発生が精力的に追究されています。超短パルス光では極めて短い時間内に光電場が集中するため、白熱電灯のような通常の光源では実現できないような瞬間的に大きな尖頭強度をもつ光電場が発生します。このような強い光電場の照射を受けた物質中には非線形分極が生じ、和周波光発生や非線形ラマン散乱などの、弱い光だけでは起こらない様々な現象が観測されるようになります。これらの非線形光学現象は単に強い光電場によって引き起こされる特殊な現象ではなく、例えばレーザー出力光の波長を望みのものに変える技術や物質の表面分子だけを選択的に観測したり分子の構造変化を追跡したりする分光に幅広く活かされています。非線形光学過程は今や、分子レベルの静的・動的性質を探る重要な分光手法とそれを支える実験技術の基盤になっているのです。この意味で、分光学による分子科学研究を推進するためには非線形光学過程を含めた光と分子の相互作用を分子の目線で理解することが欠かせません。

ほぼすべての現実の物質系の光学過程には緩和が深く関わっています。このため、分光過程の理解のためにはシュレディンガー方程式だけでなく密度行列による系の記述が必須ですが、この種の問題について初学者のレベルで分かりやすく書かれた教科書は意外と少なく、また化学系の授業で習う機会も少ないのが現状だと思います。そこで本分科会では、光と分子の相互作用を時間軸に沿った摂動の連なりと捉えることにより、様々な線形および非線形光学過程を見通し良く記述し、それらを“最短経路”で理解することをめざします。一次～三次の各次数の光学過程の例として電子吸収、和周波光発生、非線形ラマン散乱などを具体的に取り上げ、対応する分極や電気感受率に対する表式を求めることによりそれぞれの分光の背後にある光学過程についての理解を深めます。また超短パルス光を用いた非線形分光実験の仕組みと技術の最前線を紹介し、分子の電子状態や構造、それらの変化がどのような信号として観測されるのかを実例を交えながら解説します。

担当：小林 柚子（京都大学 渡邊研究室 M2）

第五分科会では、兵庫県立大学の竹内佐年先生をお招きして線形・非線形分光を光と分子の相互作用という観点から体系的に解説していただきます。竹内先生は超短パルス光を用いた時間分解分光の第一人者です。卓越した実験技術によって高い時間分解能の分光実験を可能にし、さまざまな系において光化学反応がどのような過程で起こるのか、を明らかにされてきました。

「化学反応はどのように起こるのか」

この基本的な問いに答えるために強力な手法が分光です。電子吸収、発光、ラマン分光など、それぞれの分光手法でどんな情報が得られるかは学ぶ機会が多い一方で、なぜそのような情報が得られるのかについては、曖昧な理解に終わっている人が多いのではないのでしょうか。本分科会では、光と分子の相互作用という基礎的な観点から線形・非線形分光を整理して理解することを目指します。さらに、高度な時間分解分光の手法や明らかになった化学反応のダイナミクスもご解説いただきます。

分光をやっている方にとっては理論と実験の両面から改めて理解する絶好の機会です。そうでなくても、分光学や化学反応のダイナミクスにご興味のある方はぜひ一緒に勉強しましょう。

最後になりますが、今年度の夏の学校事務局は、**加藤史明** (京都大学 渡邊研 D2), **高橋翔太** (京都大学 渡邊研 D2), **小松原航** (東京大学 五神・湯本・井手口研 D1), **木村瑠杜** (東京大学 山内研 M2), **小杉健斗** (京都大学 佐藤研 M2), **梶田瑞穂** (学習院大学 岩田研 M2), **永海貴識** (大阪大学 中野研 D1), **西田愛美** (金沢大学 水野研 D2), **鶴岡和幸** (東京大学 佃研 D2), **磯部智遥** (横浜国立大学 大野研 D1) が担当し、分科会担当者と協力して活動しております。今後ともよろしくお願いたします。