

令和 3 年 6 月 10 日現在

機関番号：63903

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17H02946

研究課題名(和文) 光合成初期過程の効率性と恒常性を制御する電荷分離・再結合反応の理論研究

研究課題名(英文) Theoretical study on charge separation and recombination dynamics to control the efficiency and stability of photosynthetic light harvesting

研究代表者

石崎 章仁 (Ishizaki, Akihito)

分子科学研究所・理論・計算分子科学研究領域・教授

研究者番号：60636207

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,770,000円

研究成果の概要(和文)：PSII初期電荷分離過程における色素分子の分子内振動とタンパク質環境の影響、それらの競合に着目し、量子動力学理論と量子化学計算を組み合わせることで解析し、電荷分離過程がタンパク質環境や外界変動に対して持つ頑健性を示した。また、有機物質における電子フォノン相互作用によるポーラロン形成および量子コヒーレンスとそのデコヒーレンスとの競合に着目し、ポーラロンの形成過程を含めた量子ダイナミクス計算を行った。その結果、ポーラロン形成がコヒーレントな超高速電荷分離過程からインコヒーレントな電荷再結合過程への遷移を引き起こし、これにより電荷再結合を遅らせることで電荷分離状態が長時間維持され得ることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

量子ダイナミクス理論・分光データ解析・計算化学を統合させることにより得られた成果は、光合成光捕集系がその効率性と恒常性を維持するために自律的に制御していると考えられる「色素分子間の光誘起電荷分離反応とそれに続く電荷再結合反応の制御の分子機構」を解明する上で重要な洞察を与えている。産業技術へ応用という視点からは、電荷再結合過程の回避・制御に関する理解の深化が挙げられる。人工光合成や太陽電池の高効率化を図る上でボトルネックになる問題の一つは、照射によって分離した電子と正孔の電荷再結合過程をどう防ぐかである。この意味で、本成果は光電変換効率の高いシステムのデザインに向けた有意義な洞察を与える。

研究成果の概要(英文)：We investigated the impacts of the protein environment and intramolecular vibrations on primary charge separation at the photosystem II reaction center (PSII-RC). We reported that individual vibrational modes play a minor role in promoting charge separation. Nevertheless, these small contributions accumulate to considerably influence the charge separation rate, resulting in subpicosecond charge separation almost independent of the driving force and temperature. The recombination of the once-separated electron and hole is a major loss mechanism in photovoltaic systems. We investigated a potential ratchet mechanism arising from the combination of quantum delocalization and its destruction. We demonstrated that the non-Markovian effect originating from the slow polaron formation suppresses the electron-transfer reaction back to the interfacial charge-transfer state stabilized at the donor-accepter interface and that it plays a role in maintaining the long-range electron-hole separation.

研究分野：化学物理学、量子開放系、凝縮相化学動力学、光と物質の相互作用

キーワード：電荷移動ダイナミクス 電荷再結合 光合成光捕集系 量子ダイナミクス 分子計測 量子もつれ光

1. 研究開始当初の背景

光合成は、太陽光という物理エネルギーを生物が利用可能な化学エネルギーに変換する分子過程である。太陽光強度が弱い場合、光捕集タンパク質によって捕集された光エネルギーは内包されるクロロフィルやカロテノイドなどの色素分子の電子励起となり、ほぼ100%の量子収率で反応中心タンパク質に輸送され、初期電荷分離反応が引き起こされることでエネルギー変換のトリガーとなる。過去30年、光合成反応中心における初期電荷分離・電子移動反応を理解するためのモデル系として紅色細菌の反応中心が詳細に調べられてきた。そこでの初期電荷分離は所謂スペシャル・ペアから数ピコ秒の時間スケールで起こることが明らかとなり、光合成反応中心の理解は一応の決着がついたと考えられていた。しかし、最近10年の間に行われた実験および解析により、緑色植物の光化学系II反応中心における初期電荷分離の動態は(これまでに研究に蓄積がある)紅色細菌の反応中心とは大きく異なることが明らかになりつつあり、緑色植物の光合成反応中心の理解は現在のところ混沌とした状態にある。

さらに、電荷分離反応は反応中心におけるエネルギー変換のトリガーとしてのみ重要となるわけではない。緑色植物が強光下に曝された場合、光捕集タンパク質に内包されるクロロフィル・クロロフィル間またはクロロフィル・カロテノイド間で光誘起電荷分離反応が起こり、その電荷再結合を通して過剰摂取した光エネルギーを熱として散逸させていることを示唆する実験データが得られつつある。しかし、クロロフィル・クロロフィル間またはクロロフィル・カロテノイド間において、①どのような条件で効率よい電子エネルギー移動が起こり、②どのような条件で電荷分離反応が起こり、さらに、③どのような条件で電荷再結合が起こり、④どのような条件で電荷再結合が避けられるのか、に関する分子論的機構は未だ大きな謎として残されていた。

2. 研究の目的

(1) 本研究計画の目的は、光合成光捕集系がその効率性と恒常性を維持するために自律的に制御していると考えられる「色素分子間の光誘起電荷分離反応とそれに続く電荷再結合反応の制御の分子機構」を明らかにすることに取り組むことである。本研究は、量子ダイナミクス理論・分光データ解析・計算化学を統合させることにより、電子状態解析・エネルギー移動・電子移動反応が独立に議論されてきた光合成光捕集系の化学物理・生物物理の裾野を広げるものである。

(2) さらに、産業技術へ応用という視点から考えられる意義として、電荷再結合過程の回避・制御に関する理解の深化が挙げられる。人工光合成・太陽電池の高効率化を図る上でボトルネックになる問題の一つは、光照射によって生じる励起子から分離した電子と正孔の電荷再結合過程をどう防ぐかである。本研究計画で取り上げる光合成光捕集系は状況に応じて電荷再結合を防ぎ、また、状況に応じて電荷再結合を巧みに利用していると示唆されている。この意味で、本研究計画は光電変換効率の高い人工光合成システムや高効率太陽電池のデザインに向けた有意義な洞察を与えるものと期待される。

3. 研究の方法

本計画遂行のために、①非平衡統計力学に基づく凝縮相量子ダイナミクス理論・光学応答理論と②量子化学計算・分子シミュレーションに基づく計算化学的アプローチを統合させることにより、緑色植物の光捕集タンパク質・反応中心タンパク質に内包された色素分子間の光誘起電荷分離とその電荷再結合を解析し、反応を制御する揺らぎの動的性質とタンパク質環境の構造変化の寄与を明らかにすることを試みた。

4. 研究成果

(1) 近年の分光実験により、緑色植物等の光化学系II (PSII) 反応中心における初期電荷分離は数百フェムト秒の時間スケールで起こることが示唆されているが、これは比較的良好に理解されている紅色細菌の反応中心に比べて約10倍も速い。本研究課題では、タンパク質の構造・色素の配置に関する小さな差異と光化学系IIの超高速電荷分離反応の実現の関係性について研究を進めた。最近の二次元電子分光データは色素の分子内振動がPSIIの電荷分離を促進する可能性を示唆しているが、電荷分離状態は光学禁制であるため詳細な情報を分光学的に得ることは容易ではない。そこで、初期電荷分離過程における色素分子の分子内振動とタンパク質環境の影響およびそれらの競合に着目し、PSIIの電荷分離の様態とそれに関与する色素分子の構造の関係性について量子動力学理論と量子化学計算を組み合わせることにより解析した。重要な成果の一つとして、全ての振動モードの寄与を考慮した場合にはPSIIの電荷分離速度に対するエネルギーギャップ依存性や温度依存性が見られなくなることを明らかにした。このことは、PSIIの電荷分離過程がタンパク質環境や外界変動に対して持つ頑健性を示唆している。

本成果は、Y. FUJIHASHI, M. HIGASHI and A. ISHIZAKI, "Intramolecular Vibrations Complement the Robustness of Primary Charge Separation in a Dimer Model of the

Photosystem II Reaction Center,” J. Phys. Chem. Lett. **9**, 4921 (2018). として出版された。

(2) 有機薄膜太陽電池はフレキシブルかつ低コストのエネルギー源として期待されている一方で、そのエネルギー変換効率は10%程度にとどまり実用化には更なる改善が必要である。有機物質では、その低誘電率のため室温の熱エネルギーよりも遥かに大きな電子・正孔の強束縛状態からの電荷分離過程が含まれており、その詳しい機構は未だ明らかではない。本研究課題では、有機物質における電子フォノン相互作用によるポーラロン形成および量子コヒーレンスとそのデコヒーレンスとの競合に着目し、ポーラロンの形成過程を正しく記述する量子ダイナミクス計算を行った。その結果、ポーラロン形成がコヒーレントな超高速電荷分離過程からインコヒーレントな電荷再結合過程への遷移を引き起こし、これにより電荷再結合を遅らせることで電荷分離状態が長時間維持され得ることを明らかにした。

本成果は、A. KATO and A. ISHIZAKI, “Non-Markovian Quantum-Classical Ratchet for Ultrafast Long-Range Electron-Hole Separation in Condensed Phases,” Phys. Rev. Lett. **121**, 026001 (2018). として出版された。

(3) 近年、冷却原子系の分野を中心に Floquet Engineering と呼ばれる考え方が注目を集めている。Floquet Engineering では、注目する系を外部から周期的に駆動することで制御し、望みのハミルトニアンや量子状態を実現し、未開の物理を探索するための舞台を与えている。本研究課題では、Floquet Engineering の枠組を凝縮相分子系におけるエネルギー移動や電荷移動など散逸系の量子ダイナミクス現象に適応し、Floquet Engineering を用いて分子間のエネルギー移動や電荷移動を操作し得ることを見出した。理論解析と数値解析により、凝縮相のような散逸や揺らぎに曝された量子系においても Floquet Engineering は頑健に機能することを明らかにした。

本成果は、N. T. PHUC and A. ISHIZAKI, “Control of Excitation Energy Transfer in Condensed Phase Molecular Systems by Floquet Engineering,” J. Phys. Chem. Lett. **9**, 1243 (2018). として出版された。

(4) 冷却原子系の分野を中心に注目を集める Floquet Engineering は、注目する系を外部から周期的に駆動することで制御し未開の物理を探索するための舞台を与える。複数サイトから成る分子ネットワークにおける量子ダイナミクスではサイト間相互作用に伴う位相つまり Peierls 位相が重要な制御パラメータとなり得ることに着目し、Floquet Engineering を用いて Peierls 位相を制御し得ることを示した。さらに、分子ループ構造における電荷輸送を取り上げ、ループが持つべき Chiral 対称性が自発的に破られること、その帰結として外部電圧なしで流れる電流が誘起され得ることを示した。

本成果は、T. P. NGUYEN and A. ISHIZAKI, “Control of Quantum Dynamics of Electron Transfer in Molecular Loop Structures: Spontaneous Breaking of Chiral Symmetry under Strong Decoherence,” Phys. Rev. B **99**, 064301 (2019). として出版された。

(5) 微小光共振器に閉じ込められた光と分子の相互作用を用いた分子系の観測と制御の理論研究を展開した。凝縮相における分子の電子励起エネルギーは気相の値から大きく変わり、また、量子ダイナミクスや化学反応ダイナミクスに大きな影響を与える。しかし、分子環境との相互作用による分光スペクトルのブロードニングのために凝縮相分子の電子励起エネルギーを正確に測定することは困難を極める。本研究課題では、分子系を微小光共振器に閉じ込められた光と強く結合させることにより生成される分子ポラリトンに着目し、凝縮相分子の電子励起エネルギーを正確に測定し得る手法を提案した。更に、分子ポラリトンに対する熱揺らぎの影響を調べることにより、分子ポラリトンのピーク幅と分子数を結ぶ指数スケールリングを導いた。この指数は分子環境のダイナミクスに関する情報を与えることを明らかにした。

本成果は、T. P. NGUYEN and A. ISHIZAKI, “Precise Determination of Excitation Energies in Condensed-Phase Molecular Systems Based on Exciton-Polariton Measurements,” Phys. Rev. Res. **1**, 033019 (2019). として出版された。

(6) 天然光合成では太陽光フォトンを受取ることで種々の動的過程が引き起こされるが、光子統計など太陽光の性質は実験で用いられるレーザー光のそれとは大きく異なる。本研究課題では、太陽光を模倣する擬サーマル光源として「時間-周波数量子もつれ光子対」を用いた新規分光計測法について研究を進めた。時間-周波数量子もつれ光子対は自発的パラメトリック下方変換 (SPDC) で生成され得るが、光子対の一方を観測しない場合、他方の光子状態は熱放射と類似の量子状態・光子統計を示す。本研究課題では、光合成色素タンパク質複合体が吸収する可視光の周波数領域で、SPDC による周波数量子もつれ光子対によって模倣された擬似太陽光すなわ

ち温度 6000 K の黒体輻射の性質、また、物質との相互作用を量子光学および量子力学の理論に基づいて解析した。

本成果は、Y. FUJIIHASHI, Y. SHIMIZU and A. ISHIZAKI, “Generation of Pseudo-sunlight via Quantum Entangled Photons and the Interaction with Molecules,” *Phys. Rev. Res.* **2**, 023256 (2020). として出版された。

(7) 上記(6)の成果を受け、量子もつれ光子など非古典光を用いた分光計測手法の理論基盤構築に関して、当初予定していなかった展開があった。

近年、非古典光を用いた量子計測技術の分子科学、物質科学への応用に向けた機運が高まりつつある。レーザーなど古典光を用いた分光計測に比して卓越した優位性を有する量子計測技術を開発する上で、光の非古典的性質が果たす役割を明確にする必要がある。本研究課題では、複雑分子系の動的過程を時間分解計測することを念頭に、量子もつれ光子対の非古典相関を利用する量子分光計測の理論研究に取り組んでいる。特に本年は、もつれ光子対の発生方法としてポンプ光に CW レーザーを用いたパラメトリック下方変換を、光学系として Hong-Ou-Mandel (HOM) 干渉計を用いて、時間分解スペクトルの定式化を行なった。レーザーを用いた分光計測では超短パルスの遅延制御によって時間分解測定を行うが、もつれ光子対の非古典的相関を用いることによって同様の時間分解測定が可能となることを見出した。さらに、もつれ光子対の非古典相関が強い極限においては、本手法で得られるスペクトル情報がフォトンエコーなど非線形光学応答として得られる二次元分光スペクトルの情報に等価であることを示した。すなわち、CW 光および HOM 干渉計など比較的簡単な光学系を用いることで、複数のレーザーパルスを用意して制御することが求められるコヒーレント多次元分光法と同等の情報が得られる。このことは、光子対の非古典相関がもたらす量子分光計測の優位性を明確に示しているだけでなく、量子分光計測を展開するうえで非古典光をどのようにデザインするべきかについて重要な指針を提供している。量子分光計測の理論基盤を確立することに成功したと言える。

本成果は、A. ISHIZAKI, “Probing Excited-state Dynamics with Quantum Entangled Photons: Correspondence to Coherent Multidimensional Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **153**, 051102 (2020). として出版された。

(8) 緑色植物の光合成におけるエネルギー変換の初期過程を明らかにするための理論基盤に関する再考を行なった。特に、光捕集タンパク質が内包色素分子の電子状態に及ぼす動的な揺らぎに着目した。光捕集タンパク質内におけるエネルギー移動過程において動的揺らぎが誘起する活性化自由エネルギーを、色素分子の電子励起エネルギー差およびタンパク質との相互作用強度を定量化する再配置エネルギーの関数として定式化した。その結果、天然の光合成に対応するパラメータ領域において、エネルギー移動に必要な活性化自由エネルギーが温度 300K における熱エネルギーに比較して十分に小さいことを明らかにした。更に、このことが天然の光合成系に対応するパラメータ領域でエネルギー移動速度が最適化されていること (A. ISHIZAKI and G. R. FLEMING, *J. Chem. Phys.* **130**, 234111 (2009).) の物理的起因であり、また、二次元フーリエ変換フォトンエコーなどの非線形レーザー分光スペクトルを用いて観測された長寿命コヒーレントビート (G. S. ENGEL et al., *Nature* **446**, 782 (2007).) の物理的起因であることを明確にした。

本成果は、A. ISHIZAKI and G. R. FLEMING, *J. Phys. Chem. B* **125**, 3286 (2021). として出版された。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 6件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Thanh Phuc Nguyen、Ishizaki Akihito	4. 巻 9
2. 論文標題 Control of Excitation Energy Transfer in Condensed Phase Molecular Systems by Floquet Engineering	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1243 ~ 1248
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.8b00067	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Phuc Nguyen Thanh、Ishizaki Akihito	4. 巻 99
2. 論文標題 Control of quantum dynamics of electron transfer in molecular loop structures: Spontaneous breaking of chiral symmetry under strong decoherence	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 064301.1 ~ 9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.064301	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kato Akihito、Ishizaki Akihito	4. 巻 121
2. 論文標題 Non-Markovian Quantum-Classical Ratchet for Ultrafast Long-Range Electron-Hole Separation in Condensed Phases	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 026001.1 ~ 5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.121.026001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Fujihashi Yuta、Higashi Masahiro、Ishizaki Akihito	4. 巻 9
2. 論文標題 Intramolecular Vibrations Complement the Robustness of Primary Charge Separation in a Dimer Model of the Photosystem II Reaction Center	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 4921 ~ 4929
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.8b02119	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fujihashi Yuta, Shimizu Ryosuke, Ishizaki Akihito	4. 巻 2
2. 論文標題 Generation of pseudo-sunlight via quantum entangled photons and the interaction with molecules	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 23256.1 ~ 23256.7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.023256	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Phuc Nguyen Thanh, Trung Pham Quang, Ishizaki Akihito	4. 巻 10
2. 論文標題 Controlling the nonadiabatic electron-transfer reaction rate through molecular-vibration polaritons in the ultrastrong coupling regime	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 7318.1 ~ 7318.11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-62899-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ishizaki Akihito	4. 巻 153
2. 論文標題 Probing excited-state dynamics with quantum entangled photons: Correspondence to coherent multidimensional spectroscopy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 051102 ~ 051102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0015432	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ishizaki Akihito	4. 巻 89
2. 論文標題 Prerequisites for Relevant Spectral Density and Convergence of Reduced Density Matrices at Low Temperatures	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 015001 ~ 015001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.015001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ishizaki Akihito, Fleming Graham R.	4. 巻 125
2. 論文標題 Insights into Photosynthetic Energy Transfer Gained from Free-Energy Structure: Coherent Transport, Incoherent Hopping, and Vibrational Assistance Revisited	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 3286 ~ 3295
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c09847	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Phuc Nguyen Thanh, Trung Pham Quang, Ishizaki Akihito	4. 巻 10
2. 論文標題 Controlling the nonadiabatic electron-transfer reaction rate through molecular-vibration polaritons in the ultrastrong coupling regime	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 7318.1 ~ 7318.11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-62899-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計37件 (うち招待講演 15件 / うち国際学会 8件)

1. 発表者名 石崎章仁
2. 発表標題 量子科学技術に基づく複雑分子系の観測と制御の理論
3. 学会等名 電気通信大学大学院情報理工学研究科講演会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 藤橋裕太, 石崎章仁
2. 発表標題 光量子科学に基づく天然光合成系の動的過程に関する理論研究
3. 学会等名 新学術領域研究「革新的光物質変換」 第3回公開シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 藤橋裕太、石崎章仁
2. 発表標題 量子科学技術に基づく複雑分子系における動的過程の理論的研究
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 藤橋裕太、石崎章仁
2. 発表標題 三光子もつれ状態に関する二光子同時計数検出を利用する時間分解分光の理論
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 ゲン タン フク、石崎章仁
2. 発表標題 エキシトン・ポラリトンをもとに凝縮相分子系の励起エネルギーの精密測定
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 ゲン タン フク、ファム クアン チュン、石崎章仁
2. 発表標題 超強結合領域で分子振動ポラリトンによって非断熱的な電子移動の反応速度の制御
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Akihito Ishizaki
2. 発表標題 Dynamics in Photosynthetic System: Quantum dissipation, vibrational assistance, and quantum light spectroscopy
3. 学会等名 The 3rd International Forum on Quantum Metrology and Sensing (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuta Fujihashi, Akihito Ishizaki
2. 発表標題 Probing excited-state dynamics with quantum entangled photons: Two-photon coincidence counting measurement with three entangled photons
3. 学会等名 The 3rd International Forum on Quantum Metrology and Sensing (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 藤橋裕太, 石崎章仁
2. 発表標題 三光子もつれ状態を用いた非線形分光法の理論的研究
3. 学会等名 量子生命科学会 第2回大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 藤橋裕太, 石崎章仁
2. 発表標題 三光子もつれ状態に関する二光子同時計数検出を利用する時間分解分光の理論
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Nguyen Thanh Phuc, Akihito Ishizaki
2. 発表標題 Control of quantum dynamics of condensed-phase molecular systems under strong decoherence
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Nguyen Thanh Phuc, Akihito Ishizaki
2. 発表標題 Control of quantum dynamics of condensed-phase molecular systems with Floquet engineering
3. 学会等名 理論計算科学の挑戦・量子化学研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Nguyen Thanh Phuc, Akihito Ishizaki
2. 発表標題 Control of quantum dynamics of electronic excitation transfer in condensed-phase molecular systems under strong decoherence
3. 学会等名 International Symposium on Frontiers of Quantum Transport in Nano Science (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Nguyen Thanh Phuc, Akihito Ishizaki
2. 発表標題 Floquet-engineered molecular systems in condensed phase
3. 学会等名 The 9th International Conference on Coherent Multidimensional Spectroscopy (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Nguyen Thanh Phuc, Akihito Ishizaki
2. 発表標題 Control of quantum dynamics of electronic excitation transfer in condensed-phase molecular systems
3. 学会等名 分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Nguyen Thanh Phuc, Akihito Ishizaki
2. 発表標題 Control of excitation energy transfer in condensed phase biological molecular systems by Floquet engineering
3. 学会等名 量子生命科学研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Akihito Kato, Akihito Ishizaki
2. 発表標題 Non-Markovian charge separation and system-reservoir correlation effect in heat transport
3. 学会等名 International Symposium on Frontiers of Quantum Transport in Nano Science (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 加藤彰人、石崎章仁
2. 発表標題 量子コヒーレンスとその破壊の組み合わせによる凝縮相中の長距離電荷分離
3. 学会等名 新学術領域研究「革新的光物質変換」第2回公開シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 加藤彰人、石崎章仁
2. 発表標題 量子コヒーレンスとその破壊の組み合わせによる凝縮相中の長距離電荷分離
3. 学会等名 スーパーコンピュータワークショップ2018
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 藤橋裕太、石崎章仁
2. 発表標題 周波数量子もつれ光を用いた分光法の理論研究
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Akihito Ishizaki
2. 発表標題 Photophysical Quantum Dynamics of Light Harvesting Processes in Photosynthetic and Photovoltaic Systems
3. 学会等名 10th Asian Photochemistry Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石崎章仁
2. 発表標題 量子散逸系として見る光合成光捕集におけるダイナミクス
3. 学会等名 応用物理学会量子エレクトロニクス研究会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石崎章仁
2. 発表標題 Intramolecular vibrations complement robustness of the primary charge separation in Photosystem II reaction center
3. 学会等名 第56回日本生物物理学学会年会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石崎章仁
2. 発表標題 量子散逸系としてみる光捕集系：PSII反応中心における初期電荷分離、有機太陽電池における電荷再結合
3. 学会等名 2018年光化学討論会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石崎章仁
2. 発表標題 Molecular encryption and processing of information
3. 学会等名 第14回日独先端科学シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Akihito Ishizaki
2. 発表標題 Effects of dephasing upon quantum dynamical phenomena in condensed phase molecular processes
3. 学会等名 Workshop on quantum effects in biological systems（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石崎章仁
2. 発表標題 量子散逸系のダイナミクス理論とその光合成初期過程への展開
3. 学会等名 理化学研究所「物質階層原理研究」第1回春期研究会（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 石崎章仁
2. 発表標題 多光子分光法の可能性 量子もつれ分光法は可能か
3. 学会等名 第14回AMO討論会（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 石崎章仁
2. 発表標題 量子散逸系として見る光合成光捕集系
3. 学会等名 2017 年度生命科学系学会合同年次大会（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 石崎章仁
2. 発表標題 量子散逸系としてみる光捕集系のエネルギー移動・電荷分離
3. 学会等名 新学術研究「光合成分子機構の学理解明と時空間制御による革新的光-物質変換系の創製」第1回公開シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 石崎章仁
2. 発表標題 量子開放系として見る光合成光捕集系: ダイナミクスと光学応答
3. 学会等名 レーザー学会第38回年次大会 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Akihito Ishizaki
2. 発表標題 Quantum dynamical aspects in biophysical and material systems
3. 学会等名 1st QST International Symposium: Quantum Life Science, (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 藤橋裕太、東雅大、石崎章仁
2. 発表標題 光化学系II反応中心の電荷分離過程における分子内振動の影響の解析
3. 学会等名 新学術領域研究「革新的光物質変換」第1回公開シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 藤橋裕太、東雅大、石崎章仁
2. 発表標題 光化学系II反応中心における初期電荷分離反応に対するタンパク質環境揺らぎと分子内振動の影響
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Nguyen Thanh Phuc
2. 発表標題 Spin Hall effect in heteronuclear molecular systems
3. 学会等名 JPS Autumn Meeting 2017
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 加藤彰人、石崎章仁
2. 発表標題 非マルコフ効果による有機薄膜太陽電池における電荷再結合からの保護
3. 学会等名 新学術領域研究「革新的光物質変換」第1回公開シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 加藤彰人、石崎章仁
2. 発表標題 非マルコフ効果による有機薄膜太陽電池における電荷再結合からの保護
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
連携研究者	東 雅大 (Higashi Masahiro) (20611479)	京都大学・大学院工学研究科・准教授 (14301)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------