

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成30年 5月30日現在

機関番号：63903

研究種目：若手研究(A)

研究期間：2013～2017

課題番号：25708003

研究課題名(和文) 光合成光捕獲系における電子エネルギー移動ダイナミクスとその環境適応性の分子理論

研究課題名(英文) Molecular theories of electronic energy transfer dynamics and their environmental regulation in photosynthetic light harvesting systems

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) 11,100,000円

研究成果の概要(和文)：近年、緑色植物等の光化学系II反応中心における初期電荷分離はサブピコ秒で起こることが実験的に示唆されている。これは紅色細菌の反応中心に比べて約10倍も速く、また、二次元電子分光データでは色素の分子内振動が初期電荷分離を促進することが示唆されている。本研究では、量子化学計算で得たクロロフィルおよびフィオフィチンのHuang-Rhys因子を用いて初期電荷分離反応の量子力学計算を行い、個々の分子内振動はPSII電荷分離に大きく寄与しないが、全モードの共同的な寄与によりPSII電荷分離が大きなstatic disorderに対して頑健なサブピコ秒電荷分離反応を引き起こしていることを明らかにした。

研究成果の概要(英文)：Photosynthetic energy conversion starts with charge separation (CS) in the reaction center (RC) protein. In particular, oxygenic photosynthesis in plants begins in photosystem II (PSII) RC. We comprehensively investigated impacts of the protein environment and intramolecular vibrational modes on the primary CS processes in the PSII-RC by combining quantum dynamic theories of condensed phase electron transfer reaction with quantum chemical calculations for evaluating the vibrational Huang-Rhys factors. We revealed that individual vibrational modes play a minor role in promoting the CS, contrary to the discussion in recent publications. However, such small contributions add up to make a big change of the CS rate, resulting in sub-picosecond CS almost independent of values of the driving force. The intramolecular vibrations maintain robustness of the CS in the PSII-RC against inherently large static disorder of the electronic energies of the electron donor and acceptor states.

研究分野：物理化学、化学物理、量子散逸系

キーワード：量子力学 光合成初期過程 電子エネルギー移動 電荷分離反応

1. 研究開始当初の背景

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・ペアからが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る。

2. 研究の目的

本研究計画では光合成光捕集系が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。

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) 分子シミュレーション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、反応を制御する環境揺らぎの動的性質を明らかにする。

4. 研究成果

本プロジェクトは、緑色植物などの光合成光捕集系における電子エネルギー移動ダイナミクスとその制御、反応中心における初期電荷分離の機構の研究に取り組んでいる。緑色植物や藍色細菌の光化学系 II 反応中心における初期電荷分離は、スペシャル・ペアの隣にあるアクセサリ・クロロフィルから数百

フェムト秒 1 ピコ秒の時間スケールで起こることが実験的に示唆されており論争が続いている。本プロジェクトでは、凝縮相量子ダイナミクスの視点から示唆されている超高速光誘起電子移動反応の可能性やその物理的原因を解析した。タンパク質の運動が色素分子の電子状態に及ぼす揺らぎ・タンパク質の再配置過程の時間スケールと色素の電子励起の量子力学的非局在化との競合が反応の様態(断熱的または非断熱的)を変化させること、その結果として光誘起電子移動反応系の電子供与体と電子受容体との結合が数十 cm^{-1} 程度である典型的な状況においてさえ数百フェムト秒の時間スケールの高速電荷分離が実現し得ることを理論的に示した。また、電子状態の揺らぎ・再配置過程の時間スケールが比較的遅い場合には、activationless なケースだけでなく逆転領域に於いても Marcus の電子移動反応理論では見られない温度依存性の逆転すなわち低温における加速が起こり得ることを見出した。

光合成光捕集系におけるエネルギー移動・電荷分離ダイナミクスを解析する有用な実験手法の一つとして二次元電子分光法が挙げられる。光合成光捕集系二次元電子分光データに見られる量子ビートの物理的起源に関して、2009 年の Ishizaki と Fleming による理論予測と 2010 年の Engel グループによる実験データの解析に基づき、色素分子の 0-0 振電遷移と別の色素分子の 0-1 振電遷移の量子力学的混合と複数のレーザーパルス照射により誘起される電子基底状態・電子励起状態両方の振動コヒーレンスが提案されている。本プロジェクトでは、色素分子の振電遷移間の量子混合がタンパク質環境に起因する揺らぎによってどのように破壊されるのかを解析し、分光データの温度依存性について整合性のある描像を与えることができた。また、タンパク質環境における揺らぎや再配置過程の中で振電遷移間の量子混合が電子励起エネルギー移動のダイナミクスに与える影響について解析し、振電遷移間の量子混合は二次元電子分光スペクトルに明白な影響を与えたとしてもエネルギー移動ダイナミクスには本質的な寄与を与えないことを明らかにした。

光合成初期過程・光捕集系における電子エネルギー移動・初期電荷分離反応の量子ダイナミクス計算・理論解析を通して得た知見をもとに、有機分子結晶で見られる超高速シングレット・フィッションが可能となる物理学的・物理化学的原因を明らかにする研究を開始した。シングレット・フィッションは 1 つの一重項励起状態から 2 つの三重項状態が生じる過程であり、有機分子結晶で観測されており、有機太陽電池の光電変換効率を向上させる新たな指針の一つとして注目されている。スピンフリップを伴う分子過程であるにも関わらず、ペンタセンやその誘導体のいくつかの系では数百フェムト秒程度で起こ

ることがレーザー分光実験によって示されている。多くの研究グループが実験・理論の両面から研究を進めているが、フィッシュンの過程や速度を支配する分子機構の詳細は現状では未解明である。本プロジェクトでは、シングレット・フィッシュン過程のダイナミクスを記述し得るハミルトニアンを構築し、我々がこれまで開発に寄与してきた量子ダイナミクス理論に基いて数値的に正確に計算することで、新たな洞察を得ようとした。現段階は未だ準備研究の段階であるが、異なる分光実験グループが見出している (1) 数種類のペンタセン誘導体のフィッシュン速度 (Yost et al, *Nat. Chem.* **6**, 492 (2014).), (2) 一重項状態と三重項状態ペアとの間の量子力学的非局在化状態 (Chan et al. *Science* **3**, 34, 1541 (2011).), (3) フィッシュン速度の温度非依存性 (Chan et al. *Nat. Chem.* **4**, 840 (2014).) を統括的に説明できつつある。

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、これは比較的よく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。本プロジェクトでは、量子化学計算で得たクロロフィル分子の分子内振動 Huang-Rhys 因子を用いた初期電荷分離反応の量子ダイナミクス計算を行い、先行研究で指摘されているような個々の分子内振動は PSII 電荷分離に大きく寄与しないが、全モードの共同的な寄与により PSII 電荷分離が大きな static disorder に対して頑健なサブピコ秒電荷分離反応を引き起こしていることを明らかにした。

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、量子コヒーレントな超高速長距離電荷分離過程に引き続くポーラロン形成がインコヒーレントな電荷輸送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

間維持される言わば量子古典ラチェット機構が起こり得ることを理論的に明らかにした。

5. 主な発表論文等

(雑誌論文)(計 15 件)

- [1] A. Kato & A. Ishizaki, “Non-Markovian quantum-classical ratchet for ultrafast long-range electron-hole separation in condensed phases,” *Phys. Rev. Lett.* **120** (2018). 印刷中. 査読あり
<https://journals.aps.org/prl/accepted/69076Y13D591dc51495c4d07e32530415482bf191>
- [2] N. T. Phuc & A. Ishizaki, “Control of excitation energy transfer in condensed phase molecular systems by Floquet engineering,” *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 1243-1248 (2018). 査読あり
DOI: 10.1021/acs.jpcclett.8b00067
- [3] 石崎章仁「物理学 70 の不思議、電子の量子状態からみる生命現象」日本物理学会誌 **72**, 81 (2017). 査読あり
https://www.jstage.jst.go.jp/article/butsuri/72/2/72_81_1/_article/-char/ja/
- [4] G. D. Scholes, G. R. Fleming, L. X. Chen, A. Aspuru-Guzik, A. Buchleitner, D. F. Coker, G. S. Engel, R. van Grondelle, A. Ishizaki, D. M. Jonas, J. S. Lundeen, J. K. McCusker, S. Mukamel, J. P. Ogilvie, A. Olaya-Castro, M. A. Ratner, F. C. Spano, B. K. Whaley, X. Y. Zhu, “Using coherence to enhance function in chemical and biophysical systems” *Nature* **543**, 647 - 656 (2017). 査読あり
DOI: 10.1038/nature21425
- [5] Y. Fujihashi, L. Chen, A. Ishizaki, J. Wang & Y. Zhao, “Effect of high-frequency modes on singlet fission dynamics,” *J. Chem. Phys.*, **146**, 044101.1-11 (2017). 査読あり
DOI: 10.1063/1.4973981
- [6] T. Teramoto, N. H. Lewis, T. Oliver, A. Ishizaki & G. R. Fleming, “Revealing the excited state dynamics of betaine-30 using two-dimensional electronic vibrational spectroscopy,” *International Conference on Ultrafast Phenomena*, OSA Technical Digest (online) (Optical Society of America, 2016), paper UTu4A.3. 査読なし
DOI: 10.1364/UP.2016.UTu4A.3
- [7] K.-W. Sun, Y. Fujihashi, A. Ishizaki & Y. Zhao, “A variational master equation approach to quantum dynamics with off-diagonal coupling in a sub-Ohmic environment,” *J. Chem. Phys.* **144**, 204106.1-8 (2016). 査読あり
DOI: 10.1063/1.4950888
- [8] Y. Fujihashi & A. Ishizaki, “Fluctuations in electronic energy affecting singlet fission dynamics and mixing with charge-transfer state: Quantum dynamics study,” *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 363-369 (2016). 査読あり

- DOI: 10.1021/acs.jpcclett.5b02678
- [9] Y. Fujihashi, G. R. Fleming & A. Ishizaki, “Influences of quantum mechanically mixed electronic and vibrational pigment states in 2D electronic spectra of photosynthetic systems: Strong electronic coupling cases,” *J. Chin. Chem. Soc.* **63**, 49-56 (2016). 査読あり
DOI: 10.1002/jccs.201500100
- [10] D. M. Monahan, L. V. Whaley-Mayda, A. Ishizaki & G. R. Fleming, “Interpreting oscillations in numerically exact simulations of 2D electronic spectra,” *Springer Proceedings in Physics* **162**, 553-556 (2015). 査読なし
DOI: 10.1007/978-3-319-13242-6_135
- [11] D. M. Monahan, L. Whaley-Mayda, A. Ishizaki & G. R. Fleming, “Influence of weak vibrational-electronic couplings on 2D electronic spectra and inter-site coherence in weakly coupled photosynthetic complexes,” *J. Chem. Phys.* **143**, 065101.1-11 (2015). 査読あり
DOI: 10.1063/1.4928068
- [12] Y. Fujihashi, G. R. Fleming & A. Ishizaki, “Impact of environmentally induced fluctuations on quantum mechanically mixed electronic and vibrational pigment states in photosynthetic energy transfer and 2D electronic spectra,” *J. Chem. Phys.* **142**, 212403.1-12 (2015). 査読あり
DOI: 10.1063/1.4914302
- [13] 石崎章仁「光合成光捕集系における電子エネルギー移動と量子コヒーレンス」レーザー研究 **41**, 391-397 (2013). 査読あり
<http://jglobal.jst.go.jp/public/20090422/201302213906126840>
- [14] A. Ishizaki, “Interactions between quantum mixing and the environmental dynamics controlling ultrafast photoinduced electron transfer and its temperature dependence,” *Chem. Lett.* **42**, 1406-1408 (2013). 査読あり
DOI: 10.1246/cl.130608
- [15] L. Banchi, G. Costagliola, A. Ishizaki & P. Giorda, “An analytical continuation approach for evaluating emission lineshapes of molecular aggregates and the adequacy of multichromophoric Forster theory,” *J. Chem. Phys.* **138**, 184107.1-14 (2013). 査読あり
DOI: 10.1063/1.4803694
- [学会発表](計 73 件)
- [1] 加藤彰人, 石崎章仁「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」日本物理学会第 73 回年次大会, 東京理科大学, 千葉県野田市, 2018 年 3 月 22 - 25 日.
- [2] 藤橋裕太, 東雅大, 石崎章仁「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」日本物理学会第 73 回年次大会, 千葉県野田市, 2018 年 3 月 22 - 25 日.
- [3] (招待講演) 石崎章仁「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」ミニワークショップ“生命と量子,” 量子科学技術研究開発機構 高崎量子応用研究所, 茨城県那珂郡東海村, 2018 年 3 月 15 日.
- [4] (招待講演) 石崎章仁「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」レーザー学会第 38 回年次大会, 京都府京都市, 2018 年 1 月 24 - 26 日.
- [5] (招待講演) 石崎章仁「量子散逸系として見る光合成光捕集系」2017 年度生命科学系学会合同年次大会, 兵庫県神戸市, 2017 年 12 月 6 - 9 日.
- [6] (招待講演) A. Ishizaki, “Quantum dynamical aspects in biophysical and material systems,” *1st QST International Symposium: Quantum Life Science*, 千葉県千葉市, 2017 年 7 月 25 - 27 日.
- [7] (招待講演) 石崎章仁「多光子分光法の可能性 量子もつれ分光法は可能か」第 14 回 AMO 討論会, 電気通信大学, 東京都調布市, 2017 年 6 月 30 日 - 7 月 1 日.
- [8] (依頼講演) 石崎章仁「量子散逸系の動力学理論とその化学・生物物理ダイナミクスへの展開」第 271 回分子工学コロキウム, 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻, 京都府京都市, 2017 年 5 月 29 日.
- [9] (招待講演) 石崎章仁「凝縮相量子ダイナミクスの理論とその光合成初期過程への展開」近畿化学協会コンピュータ化学部会例会, 大阪府大阪市, 2017 年 2 月 7 日.
- [10] (招待講演) A. Ishizaki, “Interplays between quantum effects and dynamic fluctuations in photosynthetic light harvesting,” *Workshop of Quantum Simulation and Quantum Walks 2016*, Prague (Czech Republic), 2016 年 11 月 17 - 20 日.
- [11] (招待講演) A. Ishizaki, “Interplays between quantum effects and dynamic fluctuations in photosynthetic light harvesting and application to an organic photovoltaic system,” *Indo-Japan Discussion Meeting on Frontiers in Molecular Spectroscopy: From Fundamentals to Applications on Material Science and Biology*, Kanpur (India), 2016 年 11 月 13 - 16 日.
- [12] (招待講演) 石崎章仁, “Interplays between quantum effects and dynamic fluctuations in photosynthetic light harvesting,” 国立情報学研究所, 東京都千代田区, 2016 年 10 月 24 日.
- [13] (招待講演) 石崎章仁, “Interplays between quantum effects and dynamic fluctuations in photosynthetic light harvesting,” 理化学研

- 研究所, 埼玉県和光市, 2016年9月29日.
- [14] (招待講演) A. Ishizaki, "Quantum dynamics in photosynthetic light harvesting," *Solar Fuel Catalyst Workshop*, Seoul (Korea), 2016年5月11日.
- [15] (招待講演) A. Ishizaki, "A free energy surface description of ultrafast photosynthetic energy transfer - A consideration of what coherence and incoherence mean," *DOE Workshop on Optimal Coherence in Chemical and Biophysical Dynamics*, Leesburg, VA (USA), 2016年4月4-5日.
- [16] 石崎章仁「第10回若手奨励賞 受賞講演:凝縮相量子動力学理論に基づく光合成エネルギー移動・電荷分離過程の理論研究」日本物理学会 第71回年次大会, 東北学院大学, 宮城県仙台市, 2016年3月20日.
- [17] (招待講演) A. Ishizaki, "Quantum dynamics in photosynthetic light harvesting," *7th OCARINA International Symposium*, Osaka City University, 大阪府大阪市, 2016年03月17-18日.
- [18] (招待講演) A. Ishizaki, "Fluctuations in electronic energy affecting singlet fission dynamics and mixing with charge-transfer State," *Pure and Applied Chemistry International Conference 2016*, Bangkok, (Thailand), 2016年2月9-11日.
- [19] (招待講演) 石崎章仁「凝縮相量子ダイナミクスの理論とその光合成初期過程への展開」"量子と生命"研究会, 大阪大学, 大阪府豊中市, 2016年2月8日.
- [20] (招待講演) A. Ishizaki, "Impacts of environmentally induced fluctuations on quantum mixtures in energy/charge transfer reactions and 2D electronic spectra." *The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015*, Honolulu (USA), 2015年12月15-20日.
- [21] (招待講演) A. Ishizaki, "Impacts of environmentally induced fluctuations on quantum mixing in energy/charge transfer and 2D electronic spectra," *CECAM Workshop 2015: Open Quantum Systems Computational Methods*, Hong-Kong (China), 2015年11月30日-12月4日.
- [22] (招待講演) 石崎章仁「光合成光捕集系における電子励起エネルギー移動:光学応答と量子動力学」立命館大学理工学部, 滋賀県草津市, 2015年11月20日.
- [23] (招待講演) 石崎章仁「実時間量子散逸系の理論とその光合成初期過程への展開」第9回物性科学領域横断研究会 凝縮系科学の最前線, 東京大学, 東京都文京区, 2015年11月14日.
- [24] 藤橋裕太, 石崎章仁「シングレットフィッションの量子ダイナミクスの理論解析」日本物理学会第70回秋期大会, 関西大学, 大阪府吹田市, 2015年9月16-19日.
- [25] (招待講演) A. Ishizaki, "Influences of quantum mechanically mixed electronic and vibrational pigment states in photosynthetic energy transfer and 2D electronic spectra," *The 1st Mueunjae Symposium on Chemistry & Light*, Pohang (Korea), 2015年8月7-8日.
- [26] (招待講演) 石崎章仁「高速レーザー分光と量子動力学理論で探る光合成捕集系の電荷/エネルギー移動ダイナミクス」日本学術振興会 181 委員会研究会「生命革新機能と分子複合技術 -生物の驚異的機能は人工的にできるのか?」大阪大学, 大阪府豊中市, 2015年7月7-8日.
- [27] Y. Fujihashi and A. Ishizaki, "Impact of environmentally induced fluctuations on quantum mechanically mixed electronic and vibrational pigment states in light-harvesting systems," *Quantum Effects in Biological Systems 2015*, Florence (Italy), 2015年6月29日-7月2日.
- [28] (招待講演) A. Ishizaki, "Impacts of environmentally induced fluctuations on quantum mixing in energy/charge transfer reactions and 2D electronic spectra," *The 15th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC) Satellite Meeting "Recent Advances in Quantum Dynamics and Thermodynamics of Complex Systems"*, Beijing (China), 2015年6月4-7日.
- [29] (招待講演) A. Ishizaki, "Impacts of environmentally induced fluctuations on quantum mechanical mixtures in energy/charge transfers and 2D electronic spectra," *The 3rd Workshop on Coherent Energy Transport and Optimization in Photosynthesis*, Nanyang Executive Centre, (Singapore), 2015年5月1-3日.
- [30] 石崎章仁, 藤橋裕太「電荷・エネルギー移動ダイナミクスを制御する量子混合と環境揺らぎの競合」日本物理学会 第70回年次大会, 早稲田大学, 東京都新宿区, 2015年3月21-24日.
- [31] (招待講演) A. Ishizaki, "Impact of environmentally induced fluctuations on quantum mechanically mixed electronic and vibrational states in photosynthetic energy transfer and 2D electronic spectra," *Asian Academic Seminar 2015*, Kolkata (India), 2015年3月6-10日.
- [32] (招待講演) A. Ishizaki, "Quantum dynamical aspects in photosynthetic energy transfer," *The Second China-Japan-Korea tripartite Workshop on Theoretical and Computational Chemistry*, Kobe (Japan), 2015年1月21-23日.
- [33] (招待講演) A. Ishizaki, "Impacts of protein-induced fluctuations upon quantum

- mechanically mixed vibrational states in photosynthetic energy transfer, 日本学術振興会二国間交流事業 日印セミナー, 奈良県奈良市, 2014年11月25 - 27日.
- [34] (招待講演) A. Ishizaki, “Non-Markovian quantum dynamical aspects in photosynthetic energy transfer,” *The XIXth International Workshop on Quantum Systems, in Chemistry, Physics and Biology*, Taipei (Taiwan), 2014年11月11 - 17日.
- [35] (招待講演) A. Ishizaki, “Quantum dynamic aspects in photosynthetic light harvesting - old roots, new shoots,” *International Symposium on Optobiotechnology*, Nagoya Institutes of Technology, Nagoya (Japan), 2014年10月4日.
- [36] 藤橋裕太, 石崎章仁, “Analyses of intra-molecular vibrational modes affecting excitation energy transfer in light harvesting systems,” 日本生物物理学会 第52回年会, 札幌コンベンションセンター, 北海道札幌市, 2014年9月25 - 27日.
- [37] 藤橋裕太, 石崎章仁「2次元電子スペクトルの電子・振動コヒーレンスの区別に関する理論的解析」日本物理学会 2014年秋期大会, 中部大学, 愛知県春日井市, 2014年9月07 - 10日.
- [38] D. Monahan, L. Whaley-Mayda, A. Ishizaki, G. R. Fleming, “Interpreting coherence beats in numerically exact simulations of 2D spectra,” *19th International Conference on Ultrafast Phenomena*, Okinawa (Japan) 2014年6月7 - 11日.
- [39] (招待講演) A. Ishizaki, “Impact of environment-induced fluctuations on quantum mechanically mixed electronic and vibrational states of pigments in photosynthetic energy transfer,” *Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Dresden*, Dresden (Germany), 2014年6月4 - 6日.
- [40] (招待講演) A. Ishizaki, “Energy transfer dynamics in photosynthetic light harvesting systems and their two-dimensional electronic spectra,” *2nd Sweden-Korea Joint Symposium on Advanced Spectroscopy: Light Capture and Conversion Processes in Biological and Artificial Systems*, Ystad (Sweden), 2014年5月30日 - 6月2日.
- [41] (招待講演) A. Ishizaki, “Electronic and Vibrational Coherences in Photosynthetic Energy Transfer and 2D Electronic Spectra,” *CECAM workshop “Investigating fine quantum effects in biological systems: Toward a synergy between experimental and theoretical approaches”*, Paris (France), 2014年5月28 - 30日.
- [42] (招待講演) 石崎章仁「レーザー分光と理論で探る光合成光捕集系における量子力学」第6回超高速時間分解光計測研究会 “ソフトマターの先端光計測”, 静岡県浜松市, 2014年3月4日.
- [43] (招待講演) A. Ishizaki, “What do we learn about photosynthetic light harvesting systems from long-lived electronic quantum coherence?” *German-Japanese Colloquium on Frontiers of Laser Science*, Heidelberg (Germany), 2014年1月15 - 17日.
- [44] (招待講演) A. Ishizaki, “Quantum aspects in photosynthetic light harvesting - old roots, new shoots,” *Sixth Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations*, Okazaki (Japan), 2013年11月25 - 27日.
- [45] (招待講演) A. Ishizaki, “Electronic and vibrational wavepackets in photosynthetic energy transfer” *Workshop for Quantum Simulations of Open Quantum Systems*, Freiburg (Germany) 2013年11月13 - 15日.
- [46] (招待講演) A. Ishizaki, “Electronic and vibrational wavepackets in photosynthetic energy transfer,” *Vancouver-Okazaki Workshop on Coherent and Incoherent Wave Packet Dynamics*, Okazaki (Japan), 2013年10月30日 - 11月2日.
- [47] (招待講演) A. Ishizaki, “Quantum dynamical aspects of efficient energy transfer in photosynthetic light harvesting,” *The 15th Asian Chemical Congress* (Singapore), 2013年8月19 - 23日.
- [48] (招待講演) 石崎章仁「光合成光捕獲系におけるエネルギーと電子の移動」CMSI 第1部会「新物質新量子相の基礎科学」夏の学校 2013, 山形県山形市, 2013年8月12 - 16日.
- [49] (招待講演) A. Ishizaki, “What do we learn about light harvesting systems from long-lived electronic coherence?”, *Telluride workshop “Quantum Effects in Condensed-phase Systems”*, Telluride, CO (USA), 2013年7月8 - 12日.
- [50] (招待講演) A. Ishizaki, “Quantum aspects in photosynthetic light harvesting - old roots, new shoots,” *15th Japan-Korea Symposium on Molecular Science “Hierarchical Structure from Quantum to Functions of Biological Systems”*, Kobe (Japan), 2013年7月2 - 5日.
- [51] 石崎章仁, 講演その他 23件

{ その他 }
 ホームページ等
<https://www.ims.ac.jp/research/prof/ishizaki.html>

6. 研究組織

(1) 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