

### キーワード

計算化学、理論化学、量子ダイナミクス、光合成、有機太陽電池、量子生物学、電界放出顕微鏡  
computational chemistry, theoretical chemistry, quantum dynamics, photosynthesis, organic solar cell, quantum biology, field emission microscopy

### 研究内容

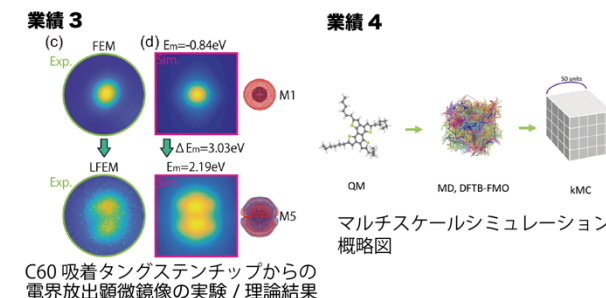
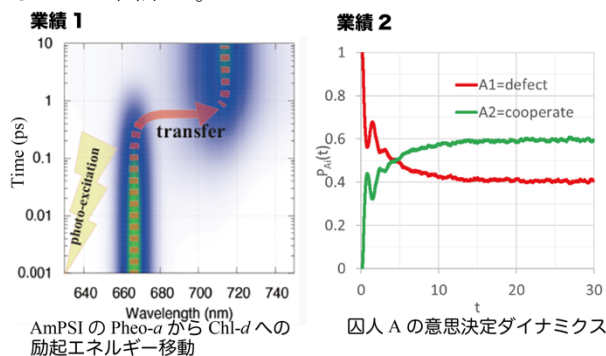
**[1] 光合成系の光捕集機構の理論解析[業績 1]**  
通常、酸素発生型光合成を行う植物やシアノバクテリアは、主要アンテナ色素としてクロロフィル a を用いる。一方、アカリオクロリス生物種は、主要アンテナ色素としてクロロフィル d を用いており、近赤外光から“省エネ”で酸素発生型光合成を行うため、その光捕集機構や光電エネルギー変換機構が注目されてきた。2021年に、共同研究グループが世界で初めて、クライオ電子顕微鏡を用いて、アカリオクロリス生物種が持つ光合成反応中心タンパク質、光化学系 I (AmPSI) の高解像度 (2.6 Å) 結晶構造解析を報告した。そこで我々は、AmPSI の構造情報を基にクロロフィル d 色素の量子化学計算と色素-タンパク質環境の静電相互作用計算から励起子ハミルトニアンを構築し、分光実験結果の理論的再現や、光捕集過程の量子ダイナミクスシミュレーションに成功した。

**[2] 意思決定の量子力学モデル[業績 2]**  
「囚人のジレンマ」問題を対象として、人間の意思決定のダイナミクスを量子力学的に記述する方法を提案した。量子散逸系のダイナミクスを近似的にシミュレーションすることができる、対称型窓関数サンプリング準古典マッピング法を用いることで、意思決定における環境との相互作用を非マルコフ・非摂動的に取り扱った。シミュレーションの結果、量子もつれを考慮した囚人 2 人の意志は、デコヒーレンスしながらナッシュ均衡やパレート最適に(熱的)緩和した。

**[3] パルス光励起によってサブナノメートルで変調する電界放出顕微鏡像[業績 3]**  
タングステンのナノチップにフラージェンを吸着させて高電圧をかけると、タングステンからトンネル効果によって電子が飛び出し、フラージェンを通り抜けてスクリーンに像を作る。我々が参加した国際共同研究チームは、パルス光照射することで、フラージェンを通り抜ける電子を制御し、スクリーンに映る像を変化させることに成功した。この電界放出顕微鏡像は、電子が通り抜けるフラージェンの電子状態(分子軌道)を反映している。そのため、この現象の制御は、1 電子源を使ったサブナノメートルの電子

スイッチとしての応用が期待できる。

**[4] ペロブスカイト太陽電池のホール輸送相のマルチスケールシミュレーション [業績 4]**  
アモルファス有機半導体のイオン移動度を予測するマルチスケール・シミュレーション手法の開発を行なった。ペロブスカイト太陽電池のホール輸送層に使われる 14 個のドナー型有機分子に対して応用したところ、その正孔移動度を高い精度で予測することが出来た。



### 最近の業績

- [1] "Theoretical Model of the Far-Red-Light-Adapted Photosystem I Reaction Center of Cyanobacterium *Acyrochloris marina* Using Chlorophyll d and the Effect of Chlorophyll Exchange", Kimura, A.; **Kitoh-Nishioka, H.**; その他 10 名. *J. Phys. Chem. B* **2022**, *126*, 4009-4021.
  - [2] "Dynamical free energy based model for quantum decision making", Tanaka, S.; Umegaki, T.; Nishiyama, A.; **Kitoh-Nishioka, H.** *Physica A* **2022**, *605*, 127979.
  - [3] "Light-Induced Subnanometric Modulation of a Single-Molecule Electron Source", Yanagisawa, H.; Bohn, M.; **Kitoh-Nishioka, H.**; Goschin, F.; Kling, M. F. *Phys. Rev. Lett.* **2023**, *130*, 106204.
  - [4] "Toward Accurate Prediction of Ion Mobility in Organic Semiconductors by Atomistic Simulation", Nakata, H.; **Kitoh-Nishioka, H.**; Sakai, W.; Choi, C. H. *J. Chem. Theory. Comput.* **2023**, *19*, 1517-1528.
- 研究奨励賞 (量子生命科学会 2022 年度)  
■ 2023 年度 生体医歯工学共同研究 (20 万円)