

2-6 各研究系の概要

2-6-1 研究系及び研究施設

理論研究系

研究目的 分子科学は量子力学を中心とする理論の進歩に基づいて発展した。また実験的研究の成果は新しい理論の開発をつなぐものである。本系では、実験部門と密接に連携した分子科学の基礎となる理論的研究を行う。

分子基礎理論第一研究部門

研究目的 分子科学の基礎となる理論的方法の開発及び分子の電子状態と化学反応性・分子構造の理論的研究

研究課題 1, 分子軌道計算に基づいた電子状態及び反応の動的機構に関する研究
2, 励起分子及 クラスタ内反応過程の電子論及び反応動力学的研究
3, 新モンテカルロ法によるタンパク質分子の立体構造予測に関する研究
4, 大エルミート行列の対角化法の開発

分子基礎理論第二研究部門

研究目的 原子、分子の動的諸過程、及び分子集合体の物性と構造の変化に関する理論的研究

研究課題 1, 化学反応諸過程の動力学に関する理論的研究
2, 原子分子過程における電子状態遷移の理論的研究
3, 凝縮系における分子の光学過程に関する理論的研究
4, 凝縮系における電子的励起の緩和と伝播の理論的研究

分子基礎理論第三研究部門(客員)

研究目的 非平衡統計力学と固体物性の研究

研究課題 1, 液体の非平衡統計力学
2, 複雑系の非線形ダイナミクス理論
3, 低次元強相関電子系の物性の理論的研究
4, 酸化物超伝導の対称性と準粒子励起の理論的研究

分子基礎理論第四研究部門

研究目的 分子性液体・固体の構造、物性及び非平衡過程に関する理論的研究

研究課題 1, 溶液中の平衡・非平衡過程に関する統計力学的研究
2, 溶液内分子の電子状態と化学反応に関する理論的研究
3, 生体高分子の溶液構造の安定性に関する統計力学的研究
4, 凝縮系における秩序形成、集団励起と電子相関に関する理論的研究
5, 凝縮系における磁性、光物性、構造の複合物性に関する理論的研究

分子構造研究系

- 研究目的 分子科学では分子内における原子の立体的配置及び動きを知ることが重要であり、そのための実験手段として各種の静的及び時間分解分光法が用いられる。これらの方法を高感度化、高精密化すると共に新しい手段の開発を行う

分子構造学第一研究部門

- 研究目的 1, 分光学的方法による短寿命分子の物理化学特性及び星間物理・化学過程の解明
2, レーザーによる気体原子の運動の制御とその応用の研究
- 研究課題 1, ミリ波・サブミリ波・遠赤外実験室分光及び宇宙電波分光による星間短寿命分子の研究
2, レーザー多光子励起による原子・分子の高励起電子状態の分光と動特性の研究
3, サブミリ波望遠鏡の開発と星間化学の研究
4, 中性原子のレーザー冷却・トラッピングの研究とその応用

分子構造学第二研究部門(客員)

- 研究目的 1, 短寿命分子の高感度高分解能分光
2, 光-光二重共鳴分光・誘導ラマン分光法の開拓
- 研究課題 1, 含遷移金属短寿命分子の回転スペクトルと分子構造の研究
2, 気相及び凝縮相における微細構造スペクトルの検出とその緩和過程の研究

分子動力学研究部門

- 研究目的 1, 生体分子及びそのモデル系の動的構造とその反応性の研究
2, 凝集性物質中の分子の動的構造と機能性との関連についての研究
- 研究課題 1, 時間分解ラマン分光法による生体分子反応中間体及び電子励起状態の分子構造の研究
2, 磁気共鳴分光とラマン分光法による凝集系中の分子の構造の研究

電子構造研究系

- 研究目的 分子および分子集合系の個性と電子構造との関係を実験的立場から研究し、分子のかくれた機能を解明するとともに、これを応用する研究を行う。

基礎電子化学研究部門

- 研究目的 分子の励起状態の研究及びその化学反応、エネルギー変換、電荷輸送制御などへの応用
- 研究課題 1, 分子間相互作用および化学反応や電荷輸送過程の分子クラスターレベルでの研究
2, 固体表面でのレーザー誘起化学反応と表面電子状態の研究

電子状態動力学研究部門

- 研究目的 励起分子の構造、化学反応、及びこれに伴う緩和の素過程を明らかにする
- 研究課題 1, 励起分子の構造及び緩和過程に関する研究
2, 原子分子衝突や化学反応素動力学の実験的研究

電子構造研究部門(客員)

- 研究目的 励起分子の動的挙動及び化学反応における分子間相互作用の研究
- 研究課題 1, 励起分子の動的挙動の研究
2, 分子間相互作用の分子構造や化学反応への影響

分子エネルギー変換研究部門(外国人客員)

- 研究目的 光エネルギー(太陽光)を電気エネルギー又は化学エネルギー(燃料)に変換する方法の基礎についての研究
- 研究課題 1, 多原子分子の解離における原子整列の研究
2, 光励起表面反応の走査型トンネル顕微鏡による研究
3, プロトントンネルの理論的研究
4, 多参照結合クラスター理論とその応用

分子集団研究系

- 研究目的 新しい物性をもつ物質の構築並びにその物性の研究。分子と凝縮相の接点を求めながら、分子集合体の物性・反応の新領域の開発に取り組む。

物性化学研究部門

- 研究目的 分子性固体の化学と物理
- 研究課題 1, 分子性導体の機能探査と電子構造の研究
2, 導電性有機固体の電子物性の研究

分子集団動力学研究部門

- 研究目的 分子集合体の物性機能発現と凝縮系の動的物性の研究
- 研究課題 1, 有機磁性金属、超伝導体の開発と物性研究
2, 凝縮系における原子・分子の動的過程と結びついた物性の研究に取り組む

分子集団研究部門(客員)

- 研究目的 分子及び分子集団の構造と物性の研究
- 研究課題 興味ある物性を持つ新物質の開発

相関領域研究系

- 研究目的 分子科学の成果を関連分野の研究に反映させ また関連分野で得られた成果を分子科学の所究に取り入れるなど両者の連携を図るための相関領域に関する研究を行う。

相関分子科学第一研究部門

- 研究目的 有機化学・有機金属錯体化学さらには酵素化学を含む分子科学関連分野の諸問題を 特に分子の構造とその機能という分子科学の観点から研究
- 研究課題 1, 金属酵素及び合成モデル系の構造と機能の解明
2, 新規分子性強磁性体の構築とその磁気構造の解明

相関分子科学第二研究部門(客員)

- 研究目的 1, 新規な化学種の有機化学・有機金属化学・無機化学的視点による分子設計
2, 有機導体の理論的研究
- 研究課題 1, 特異な構造を有する金属クラスターの構造解析
2, 新規な有機磁性体の開発
3, 有機導体における様々な相転移の機構に関する理論的研究

分子クラスター研究部門(流動)

- 研究目的 1, 分子クラスターの構造 ,性質の基礎的解明
2, 新しい分子クラスターの探索と分子クラスターを用いた新材料の開発
- 研究課題 1, 分子クラスターイオンの赤外光解離分光法による分子間電荷移動と構造の解析
2, 光電子分光法を用いた分子クラスター負イオンの電子構造の解明
3, 分子クラスターイオンを用いたイオン - 分子反応の研究

極端紫外光科学研究系

- 研究目的 極端紫外光実験施設のシンクロトロン光源は 軟X線領域から遠赤外光までの広範囲な光を安定に供給している。本研究系では この放射光源を用いて 放射光分子科学の新分野を発展させる中核としての役割を果たす。特に放射光及び放射光とレーザーの同期などによる気相・液相・固体・固体表面の光化学及び新物質合成を目指した研究を展開する。

基礎光化学研究部門

- 研究目的 分子及び分子集合体の光化学並びに化学反応素過程の所究
- 研究課題 1, 軟X線分光による分子及び分子集合体の光化学・光物性研究
2, レーザー光及び放射光を用いた光化学反応の研究

反応動力学研究部門

- 研究目的 極端紫外光を用いた化学反応動力学の研究
- 研究課題 1, 極端紫外光による表面光化学反応とその場観察の研究
2, 価電子励起領域の光イオン化ダイナミクス
3, 放射光に同期した紫外レーザーシステムの開発とその分子研究への利用
4, 極端紫外光を用いた表面ナノ加工の研究

界面分子科学研究部門(流動)

- 研究目的 界面関連分子の反応論的及び分光学的研究
- 研究課題 1, 基礎的・機能性分子の高励起状態に関する研究
2, 放射光励起角度分解紫外光電子分光法による機能性有機薄膜・界面の電子構造に関する研究
3, 放射光プロセスを用いた量子ドットの形成
4, 振動分光法を用いた低温分子吸着表面の動力学の性質に関する研究
5, シンクロトロン放射光を用いた低温分子凝縮相における粒子脱離過程の研究

極端紫外光研究部門(外国人客員)

- 研究目的 世界唯一の化学専用極端紫外光を利用した化学の反応、合成等全般についての研究
- 研究課題 1, ポリマー、フラレン、有機物質における光誘起現象と分極
2, ポリマー及び合成分子のスピン密度波と有機強磁性
3, ポリマーの非対角電子相関とコヒーレンス長
4, 強誘電性及び反強誘電性液晶における自発分極発生機構
5, 固液境界面の微視的構造に関する統計力学的研究
6, アルカリ土類ハライドのオーージェフリー発光の寿命測定
7, 高速シンチレータのダイナミクスに関する研究

研究施設

電子計算機センター

- 研究目的 化学反応素過程の理論的研究
- 研究課題 1, 化学反応動力学の基礎的研究
2, 大規模電子状態計算の手法の開発とその応用

分子制御レーザー開発研究センター

- 研究目的 新しいレーザーシステムの開発研究
- 研究課題 1, 超短パルスレーザーシステムの開発研究
2, 遠赤外領域での超高速分光システムの研究
3, 放射光との同期による過渡分光システムの開発

分子物質開発研究センター

- 研究目的 新たな機能を有する分子の設計、開発および評価に関する研究
- 研究課題 1, 新規な 電子ドナ - およびアクセプタ - 分子に基づく有機導電体の開発研究
2, 酵素の構造と機能発現および人工酵素の分子設計の研究
3, 水素引き抜き反応による炭化水素類の物質変換の研究
4, 有機分子性結晶の高圧構造と金属化の研究

装置開発室

- 研究目的 新しい実験装置の設計及び製作 ,既設装置の性能向上に関する研究
- 研究課題 1, 超高真空用油滑膜とアクチュエータの開発
2, 精密物性測定装置の開発
3, 研究機器の自動制御の研究
4, 非線型分光法の研究

極端紫外光実験施設

- 研究目的 シンクロトロン放射による極端紫外光源の研究・開発とこれを用いた分子科学の研究
- 研究課題 1, 極端紫外光源の研究・開発
2, 極端紫外用観測システムの開発と気体及び固体の分光学的研究

錯体化学実験施設

- 研究目的 金属原子を含む化合物を中心とする広範な物質を対象とし ,その構造 ,物性 ,反応性等を研究し ,新物質創造のための設計 ,開発を目的とする。

錯体合成研究部門(流動)

- 研究目的 新しい構造や特異な機能を有する金属錯体の合成並びに機能発現・金属イオンを含む金属蛋白質の構造及び機能解明
- 研究課題 1, 界面への金属錯体の分子配列を目指した表面錯体化学及びその応用
2, タンパク中においてアセンブルされた金属イオンによる電子伝達と小分子の反応

錯体触媒研究部門

- 研究目的 生体分子と金属錯体が形成する超分子に関する研究
- 研究課題 1, 特定のDNA塩基配列を標的とする人工金属錯体
2, 金属整列能をもつ人工DNA様オリゴマー
3, DNA結合能をもつペプチド金属錯体
4, 生命誕生前の生体高分子形成における金属イオンの役割
5, 金属医薬品の合成

錯体物性研究部門

研究目的 金属錯体の合成と物質変換に関する所究

- 研究課題
- 1, 二酸化炭素固定
 - 2, プロトン濃度変化を利用したエネルギー変換の開発
 - 3, 自己組織性精密分子システムの設計・創成・機能発現

配位結合研究部門(客員)

研究目的 3次元金属錯体超分子の合成 機能と結晶構造制御