

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うながすものである。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 ,励起分子及びクラスター内反応過程の電子論及び反応動力学的研究
 - 3 ,分子シミュレーションによるタンパク質の立体構造予測及び折り畳みに関する研究

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 水素結合系液体・固体・クラスターの構造・安定性・ダイナミックスの理論的研究

- 研究課題
- 1 ,液液相転移の機構・ダイナミックスとポテンシャル面
 - 2 ,包接水和物の安定性と生成・解離の機構
 - 3 ,束縛条件下での水の相挙動
 - 4 ,水クラスターの構造と安定性

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 ,固体 - 液体界面の統計力学的研究
 - 5 ,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
 - 6 ,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, フラーレン分子の構造と機能
2, 呼吸系末端酸化酵素の構造と機能
- 研究課題 1, 金属ドープ型フラーレンの構造と電子的特性
2, キノールオキシデースのヘム近傍構造の解明

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, ナノクラスターの構造と機能発現機構の解明

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 ,放射光励起表面反応の走査型トンネル顕微鏡によるその場観察
2 ,分子性溶液中のイオン拡散
3 ,プロトントンネルの理論的研究
4 ,金属錯体によるDNAの構造・機能制御

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、分子物性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開拓と物性解明
- 研究課題 1 ,有機磁性金属・超伝導体の開発と物性研究
2 ,分子素子の基礎研究

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研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 分子性結晶の特に表面における励起子の動的過程の解明

研究課題 1, 励起子に起因する原子の脱離機構の研究
2, 励起子の緩和過程とその分岐比の研究

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, 原子・分子・クラスターの電子状態に対する理論的研究
2, 分子クラスターの分子間大振幅振動遷移の直接観測
3, 対流圏大気中におけるクラスターイオン生成過程の研究

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進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創製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
3, 超高速分光による分子ダイナミクスの研究

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 ,気相における光イオン化及び光解離のダイナミックス
 - 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科学研究への利用
 - 4 ,極端紫外光反応を用いた表面ナノ構造の形成とその物性の研究

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 ,放射光プロセスを用いたナノ加工及びナノ領域の非線形光学特性
 - 2 ,シンクロトロン放射光を用いた光化学素過程とサイトスペシフィック効果
 - 3 ,放射光を用いた化合物半導体の電子構造に関する研究
 - 4 ,小形放射光装置とウィグラーの開発

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 ,新規分子性導体とその高分子膜の研究
 - 2 ,表面反応の STM 及び IRRAS による研究
 - 3 ,超短波パルス光によるクーロン爆発の研究
 - 4 ,モデル内殻ポテンシャル法の新展開
 - 5 ,蛋白質内に埋め込んだ Mn(salen)錯体による不斉酸化反応の開発

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 分子科学の今後の発展のために, 分子科学の研究手段としてふさわしい, 市販にはない新しいレーザーシステムを開発し, 新しい分野の開拓を目指す。
- 研究課題
- 1 ,分子指紋領域ピコ秒フェムト秒レーザーシステムの開発とそれを用いた分子小集団系の反応制御
 - 2 ,放射光に完全同期した紫外レーザーシステムの開発とその分子科学研究への応用
 - 3 ,赤外パルスレーザーシステムの開発とそれを用いた時間分解振動分光

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 電子ドナーおよびアクセプター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 ,分子デバイス材料の開発研究

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ならびに機能発現
- 研究課題 1 ,金属錯体による酸素分子の活性化の機構解明
2 ,神経性疾患と金属イオンとの関連性

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 ,生体微量金属錯体の生物無機化学
2 ,生体関連活性酸素の機能と構造
3 ,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
4 ,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