

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構造の理論的研究
研究課題 1 ,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 タンパクフォールディングと立体構造予測及び物質複合系の非線形挙動に関する理論的研究
研究課題 1 ,混合溶媒中における溶質分子の立体構造および微粒子間相互作用
2 ,両親媒性分子の自己組織化機構および分子集合体の組織形態
3 ,アミノ酸間平均距離に基づく残基間有効ポテンシャルのタンパク構造予測への応用
4 ,ゲノム解析におけるドメインの位置の予測

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分光法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、高精度化すると共に時間・空間分解能を高める事も含め新しい手段の開発をおこなう

分子構造学第一研究部門

研究目的 1 ,分子及び分子集団の時間的・空間的挙動を通じた化学的性質の解明

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 ,極めて高い空間分解能をもつ高速分光法による凝縮相分子ダイナミクスの研究

2 ,液体ヘリウム中の原子・分子・イオンの分光学的研究

3 ,ヘリウム原子のレーザー冷却・トラッピングの研究

分子構造学第二研究部門（客員）

研究目的 1 ,フラレン分子の構造と機能

2 ,中性原子のレーザー冷却の研究

研究課題 1 ,金属ドープ型フラレンの構造と電子的特性

2 ,種々のモードのレーザー光のレーザー冷却への応用

分子動力学研究部門

研究目的 1 ,金属タンパク質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蛋白質超高速ダイナミクス及び酵素反応中間体の分子構造の研究

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 , dendrimer-金属ポルフィリンの時間分解共鳴ラマン分光
2 ,ラジカルクラスターの超音速ジェットミリ波分光
3 ,新規有機超伝導体の開発

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 ,単一分子金属・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 非ヘム金属酵素による酸素分子活性化機構の解明

研究課題 1 ,非ヘム酵素の活性中心構造のモデル錯体合成
2 ,不安定酸素活性種のキャラクタリゼーション

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 ,新規な分子クラスターの構造選別と立体反応ダイナミクス解明
2 ,固体高分解能 NMR による微粒子の研究
3 ,ゲルの生成過程、ヘリウムランダムポテンシャル中の物性のシミュレーション

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ナノマテリアル創製など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 ,化学反応の量子動力学の理論的研究
 - 2 ,固体レーザーの超小形高輝度化に関する研究
 - 3 ,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

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，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 ,超高真空用潤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

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。

錯体触媒研究部門

- 研究目的 遷移金属錯体触媒による有機分子変換反応の開発
- 研究課題 1 ,完全水系メディア中での触媒反応
2 ,新規不斉触媒の開発
3 ,錯体触媒の固定化と新機能

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
4 ,金属カルコゲニド化合物の合成と多核機能化

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

電子計算機室

- 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