

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 ,分子の設計と反応の理論計算
- 2 ,分子シミュレーションにおける新手法の開発と生体高分子の立体構造の理論的研究

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 1 ,リアル系のシミュレーションとダイナミクス理論の開発及び理論計算に基づく分子設計と反応制御の研究
- 2 ,化学反応における量子効果に関する理論的研究
- 研究課題 1 ,理論開発。ab initio 分子軌道理論、密度汎関数理論、相対論的分子理論の開発
- 2 ,プログラム開発。分子理論プログラムパッケージ、UTChem の開発
- 3 ,化学反応過程における電子的非断熱遷移の理論的研究
- 4 ,ヘリウムクラスター中の分子の動的過程に関する理論的研究

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 ,界面における液体の統計力学的研究
- 5 ,分子性物質の電子物性における次元性と電子相関に関する理論的研究
- 6 ,光誘起非線型ダイナミクスと秩序形成過程に関する理論的研究

分子構造研究系

- 研究目的 分子科学では原子・分子の立体配置及び動きを知ること,またそれらと電子状態の相関を解明す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およ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,高精密化するとともに時間・空間分解能を高めることも含め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,蛋白質の構造と機能
2,物質の界面近傍における吸着分子の動的挙動の研究
- 研究課題 1,蛋白質水溶液の高分解能核磁気共鳴
2,界面近傍のみを特異的にとらえることのできる分光法を用いた,吸着分子のピコ秒オーダーの動的挙動,電子格子相互作用などの解明

分子動力学研究部門

- 研究目的 1,磁性薄膜における表面分子化学的磁化制御
2,凝集性物質中の分子磁性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,X線磁気円二色性と磁気光学Kerr効果による新規磁性薄膜の探索と表面分子化学的な磁化制御の検討
2,磁気共鳴分光とラマン分光法による凝集系中の分子磁性の研究

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 ,内殻励起・イオンの量子化学
- 2 ,多次元系における非断熱動力学の理論的研究
- 3 ,ヘム蛋白質及びその関連モデル化合物の電子状態
- 4 ,分子性磁性体の単結晶の磁気物性研究
- 5 ,放射光を利用した極端紫外域の分光学と動力学

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 ,磁性有機超伝導体・単一分子金属の開発と物性
- 2 ,新規な機能性分子物質の開発

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 1 ,興味ある物性を持つ新物質の開発
- 2 ,分子素子の基礎研究

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 ,金属タンパク質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 フラーレン分子の基礎研究とその応用
- 研究課題 金属フラーレンを用いた新規機能性物質の開発

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、ナノ物性、ナノバイオマテリアル創製などを旨と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STMによるその場観察の研究
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シリコン表面ナノ構造の形成と生体機能物質の集積

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 ,化学反応動力学の理論的研究
2 ,分子および分子集合系の分子構造・電子構造と物性

- 3 ,極端紫外光分子科学の研究
- 4 ,金属原子を含む化合物 , 新物質創成
- 5 ,ナノスケール分子科学の研究

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

分子スケールナノサイエンスセンター

- 研究目的 原子・分子サイズでの物質の構造および形状の解明と制御 , さらに新しい機能を備えたナノレベルでの新分子系「分子素子」の開発とその電子物性の解明を行うとともに , このような研究を進展させる新しい方法論の開発を行う。

分子金属素子・分子エレクトロニクス研究部門

- 研究目的 分子スケール電子物性研究の基礎となる機能性分子の開発およびその電子物性計測技術の確立を目指す。
- 研究課題 1 , 分子電子素子のための分子設計と合成およびナノデバイスの作成
2 , 巨大分子系合成の研究
3 , 有機電界効果トランジスターの作成と特性評価
4 , シリコン - 炭素共有結合性ナノインターフェースの構築
5 , 分子エレクトロニクス素子のための有機半導体の開発

ナノ触媒・生命分子素子研究部門

- 研究目的 触媒機能発現機構の解明と理解の上に立った新しい機能を発現する新触媒の創成および生体分子が示す特徴を活用した反応制御 , エネルギー変換 , 情報伝達系などの新たな設計指針の確立を目指す。
- 研究課題 1 , 両親媒性レジタン持ナノパラジウム触媒の創成 : 設計・調整および水中触媒作用
2 , 光励起電子移動を利用した触媒反応の開発
3 , 大型有機分子を用いたナノ反応場の設計と制御

ナノ光計測研究部門

- 研究目的 新たなナノ空間・ナノ構造体の計測手法を用いて , ナノ空間内の現象解明とその分子科学的応用を行う。

- 研究課題
- 1 ,ナノサイエンス研究に適した極端紫外光源の開発
 - 2 ,サブナノ金属クラスターの調整と構造評価
 - 3 ,有機単分子膜によって保護された金属クラスターの構造解析

界面分子科学研究部門（流動）

研究目的 界面ナノ構造と分子の相互作用の反応論的及び分光学的研究

- 研究課題
- 1 ,光触媒表面の励起状態空間分布の開発
 - 2 ,STM による固体表面吸着現象の観察
 - 3 ,内殻励起によるフッ素系高分子膜の選択的光分解反応
 - 4 ,金属単結晶上に配向した有機分子薄膜の角度分解光電子分光

分子クラスター研究部門（流動）

研究目的 分子がクラスターを形成することによる構造や性質の変化を明らかにするとともに、新しい分子クラスターや分子構造体の創成やその機構の解明を行う。

- 研究課題
- 1 ,固液界面における光化学反応の強磁場効果
 - 2 ,勾配磁場内における常磁性イオン移動
 - 3 ,光還元する分子をゲストとする包接体の理論的研究
 - 4 ,ポテンシャル面の自動的・効率的生成の理論的研究

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 ,酸塩基中和反応を駆動力とする化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換
 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 分子および分子集合体の計算科学的研究
 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
 3 ,凝集系の計算機シミュレーション

機構共通研究施設（分子科学研究所関連）

統合バイオサイエンスセンター

- 研究目的 生命現象の基本に関する諸問題を分子レベルから細胞，組織，個体レベルまで統合的に捉える新しいバイオサイエンスの基礎的研究を展開する
 研究課題 1 ,蛋白質の機能と高次構造ダイナミクス
 2 ,一分子生理学：生体分子機械の動作機構を光学顕微鏡下で探る
 3 ,センサー機能を有する金属タンパク質の構造と機能
 4 ,酸素分子を活性化する金属酵素の機能発現の分子メカニズム

計算科学研究センター

- 研究目的 分子および分子集合体の計算科学的研究
 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
 3 ,凝集系の計算機シミュレーション