

## 2-6 研究系及び研究施設の概要

### 理論分子科学研究系

研究目的 分子科学は量子力学および統計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

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

#### 分子基礎理論第四研究部門（客員）

研究目的 1 ,凝縮系における化学反応ダイナミクスに関する理論的・計算科学的研究  
2 ,凝縮系における光と分子の相互作用および分子間相互作用に関する理論的研究

研究課題 1 ,凝縮系化学反応における分子エネルギー移動過程の理論的研究  
2 ,自由エネルギー勾配法の開発・溶質分子の構造最適化プログラムの開発と個別反応への適用  
3 ,液体および生体分子系における分子間振動相互作用と振動励起移動および光学的性質に関する理論的研究  
4 ,分子振動の諸性質と理論的に解析するためのソフトウェアの開発と応用

## 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、更に生体機能との関連等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物理化学的性質の解明  
2 ,固体高分解能 NMR による生体分子の構造・運動性解析

**研究課題** 1 ,極めて高い空間分解能を持つ先端的分光法による、分子集団の励起ダイナミクス、微粒子系における励起状態と増強電場の研究  
2 ,分子配向を決定するための配向試料用新規固体 NMR 測定法の開発  
3 ,生体脂質膜と相互作用するペプチドの脂質二重膜上での構造・運動性の固体 NMR による解析

### 分子構造学第二研究部門（客員）

**研究目的** 1 ,蛋白質ダイナミクスの解明  
2 ,タンパク質と RNA の相互作用の解析

**研究課題** 1 ,レーザー分光を手段として、機能性蛋白質の反応過程における、エネルギーや構造ダイナミクスを時間分解で明らかにする  
2 ,生体内に多数存在することが明らかになった noncoding RNA の機能解明のため、タンパク質との相互作用に焦点をあて、解析技術の開発を行う

### 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 ,低侵襲的生体分子イメージング法に関する研究

**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 ,蛍光・発光蛋白質を利用した蛋白質オルガネラ移行と遺伝子発現の時空間解析法の開発

## 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。分子と分子集合体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 新規な機能性分子システムの開発

#### 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と物性
  - 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 無機化学，有機化学，高分子化学，超分子科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 ,樹木状金属集積体を用いたスピン空間の構築と機能開拓  
2 ,分子プログラムに基づいた光機能性ナノ構造体の構築

### 相関分子科学第二研究部門（客員）

研究目的 新しい機能をもつ無機・有機物質の開発研究

研究課題 1 ,熱電素子や触媒機能をもつ遷移金属の化合物・合金・ナノ構造の電子構造・物性相関の研究  
2 ,生体関連分子の特徴を生かした機能性分子の合成，それらの金属錯化挙動やアニオン認識能，光物性などの検証，さらに，分子間相互作用を利用したナノ・マイクロメータースケール超分子組織体の構築

## 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 ,短パルス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 ,気相における光イオン化及び光解離のダイナミクス  
2 ,放射光に同期したレーザーシステムの開発とその分子科学研究への利用  
3 ,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情報伝達受信素子製作

### 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

#### 計算分子科学研究系

研究目的 分子および分子集合体の計算科学的研究

#### 計算分子科学第一研究部門

研究目的 分子および分子集合体の構造と動力学に関する計算科学的研究

- 研究課題
- 1 ,凝集系における溶質, 溶媒の量子動力学シミュレーション
  - 2 ,複雑な古典凝集系の分子動力学シミュレーション
  - 3 ,界面和周波発生分光の計算手法の開発

#### 計算分子科学第二研究部門

研究目的 分子および分子集合体の機能と物性に関する計算科学的研究

- 研究課題
- 1 ,凝縮系におけるダイナミクスと多次元分光法の理論および数値解析
  - 2 ,生体高分子の構造変化と機能発現に関する分子動力学計算

#### 研究施設

##### 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, 反応性等を探索することにより, 新物質創造のための設計指針ならびに新規反応系を開発することを目的とする。

##### 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

#### 錯体触媒研究部門

研究目的 遷移金属錯体による有機分子変換反応の開発

- 研究課題
- 1 ,多重応答型錯体の合成と外場応答
  - 2 ,新規不斉触媒の開発
  - 3 ,錯体触媒の固定化と新機能
  - 4 ,機能性ナノ錯体分子の開発

#### 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 ,非伝統的手法による無機ナノ構造体の作成
  - 4 ,分子スケールプローバーの開発
  - 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 ,両親媒性レジタン担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
  - 4 ,新規不斉錯体触媒の開発
  - 5 ,ポウル型共役分子の設計・合成および機能
  - 6 ,金属ナノ粒子を用いた触媒反応の開発

#### 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 ,非線形分光による固体・ナノ構造体表面でのダイナミックス
  - 2 ,サブナノ金属クラスターの調整と構造, 電子状態, 反応性評価
  - 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

#### 先導分子科学研究部門(客員)

- 研究目的 超高磁場核磁気共鳴(NMR)法を用いて生体高分子の作動機構を原子分解能で解明する
- 研究課題
- 1 ,高分解能 NMR 計測による複合糖質・タンパク質の精密構造解析
  - 2 ,NMR を利用した生体高分子の相互作用と内部運動の解析
  - 3 ,超高磁場固体 NMR 法の生体分子への応用

#### 極端紫外光研究施設

- 研究目的 電子蓄積リングを利用した極端紫外光源の研究・開発とシンクロトロン放射を用いた分子科学の研究
- 研究課題
- 1 ,極端紫外光源の高度化と先進放射光源に関する開発研究
  - 2 ,相対論的電子ビームを用いた光発生法の開発研究, 及びビーム物理学研究
  - 3 ,極端紫外光を用いた光物性実験用の観測システムの開発とそれを用いた分光学的研究
  - 4 ,極端紫外光を用いた光化学実験用の観測システムの開発とそれを用いた分光学的研究

#### 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, 光分子科学における新しい分野の開拓を目指す。
- 研究課題
- 1 ,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
  - 2 ,赤外パルスレーザーシステムの開発とその分子科学研究への応用

#### 装置開発室

- 研究目的 実験装置の設計・製作および技術開発
- 研究課題
- 1 ,放電加工, 切削加工, レーザー加工による微細加工の開発と応用
  - 2 ,ワンチップ MCU を使った自動制御装置の開発
  - 3 ,CPLD, FPGA を用いた高速デジタル回路の開発

#### 安全衛生管理室

- 業務目的 研究所における快適な職場環境の実現と労働条件の改善を通じて職場における職員の安全と健康を確保するための専門的業務を行う