

3-1 研究領域

理論・計算分子科学研究領域

- 研究目的 分子およびその集合体（気相，液相，固相），さらには生体分子やナノ物質など複雑系や複合系に関する構造および機能を量子力学，統計力学，分子シミュレーションを中心とした理論・計算分子科学の方法により解明する。

理論分子科学第一研究部門

- 研究目的 分子科学の基礎となる理論的方法の開発と分子構造，電子状態，反応の理論的研究
- 研究課題 1 ,分子の設計と反応の理論と計算
2 ,ナノ構造体における電子・核・電磁場ダイナミクスの理論的・数値計算的研究
3 ,大規模量子化学計算
4 ,高精度多参照理論の手法開発と計算

理論分子科学第二研究部門

- 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 ,生体高分子の溶媒和構造および分子認識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 ,光誘起非線型現象，秩序形成および融解過程に関する理論的研究

計算分子科学研究部門

- 研究目的 分子および分子集合体の電子状態，物性，ダイナミクスに関する理論・計算科学的研究
- 研究課題 1 ,高精度電子状態理論の開発と理論精密分光・光物性科学への応用
2 ,凝縮系のダイナミクスと多次元分光法の理論・計算科学的研究
3 ,分子動力学シミュレーションにおける新しい手法の開発と生体系への応用

理論・計算分子科学研究部門（客員）

- 研究目的 1 ,多状態ダイナミクスに関する理論的研究
2 ,次世代分子理論とそのソフトウェアの開発
3 ,生体分子機能の分子機構に関する理論的・計算化学的研究
- 研究課題 1 ,QM/MM 法に基づく凝縮系光反応ダイナミクス
2 ,スピン - 軌道結合を考慮した重原子開殻系の多状態ダイナミクス
3 ,大規模分子理論の開発と化学現象への適用
4 ,高精度な相対論的分子理論の開発
5 ,量子化学プログラムパッケージ「NTChem」の開発

- 6 ,酵素反応の自由エネルギー経路と反応動力学に関する理論的研究
- 7 ,タンパク質分子機能に関わるタンパク質ダイナミクスの理論的研究

光分子科学研究領域

研究目的 物質に光を照射すると、様々な興味深い性質を現したり、化学反応をおこす。様々な分子物質の構造や性質を光で調べることで、反応や物性を光で制御すること、及びそれに必要となる高度な光源開発を目的として研究を行う。

光分子科学第一研究部門

研究目的 主としてレーザー光源を用いた先端的分光法、顕微鏡法等を用いて、分子とその集合体の高精度・高精細な構造を明らかにすると同時に、新たな光機能の開拓や物質特性の光制御を目指した研究を行う

- 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 ,高強度かつ高コヒーレント光による分子運動の量子状態操作法の開拓、ならびに、分子構造や反応ダイナミクス研究への適用

光分子科学第二研究部門

研究目的 物質の量子論的な性質を、デザインされた光電場で詳細に観察し制御するための新しい方法論と、それを支える高度な光源の開発を目指した研究を行う

- 研究課題
- 1 ,高度にデザインされたレーザー場を用いて、原子・分子およびその集合体の量子ダイナミクスを精密に観測・制御するための研究

光分子科学第三研究部門

研究目的 真空紫外光や軟X線を用いた新奇な励起分子ダイナミクスの開拓と、それに関する動的プロセスの解明および制御を目指した研究を行う

- 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 ,極短パルス光による超高速現象の追跡
 - 4 ,気相分子の光励起と光イオン化のダイナミクス

光分子科学第四研究部門（客員）

研究目的 比較的簡単な分子から、固体表面に吸着した分子やナノ構造体、さらに生体内分子までを広く対象とし、高度な時間分解・空間分解分光法、極端紫外光や特殊波長レーザー等を用いた光学測定によりそれらの性質を明らかにする

- 研究課題
- 1 ,アト秒光パルスを用いた超高速分子ダイナミクスの研究
 - 2 ,非線形・超高速・振動分光法による凝縮相分子の動的挙動の研究

- 3 ,有機固体 , 有機界面・表面の電子構造・物性相関の研究
- 4 ,光化学測定放射光ビームラインの開発研究

光源加速器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

- 研究目的 シンクロトロン光源用電子加速器に関する開発研究を行う
- 研究課題 1 ,先進的な光源加速器の設計開発研究
- 2 ,相対論的電子ビームを用いた新しい光発生法に関する研究

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

- 研究目的 シンクロトロン光源・自由電子レーザーなどの高性能化のための電子ビーム制御技術の開発研究を行う
- 研究課題 1 ,電子ビーム計測・制御技術に関する開発研究
- 2 ,加速器におけるビーム物理学研究
- 3 ,自由電子レーザーにおけるビーム物理学研究

光物性測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

- 研究目的 固体の新奇物性に関わる電子状態を , 新規に開発した放射光赤外・テラヘルツ分光および高分解能三次元角度分解光電子分光により明らかにする
- 研究課題 1 ,放射光を用いた固体分光用の観測システムの開発
- 2 ,固体物質の局在から遍歴に至る電子状態の分光研究

光化学測定器開発研究部門（極端紫外光研究施設）

- 研究目的 放射光軟X線を利用した新しい分光法の開発とそれを用いた内殻励起における多電子効果の解明を目指した研究を行う
- 研究課題 1 ,放射光を用いた光化学実験用の観測システムの開発
- 2 ,原子分子における多電子過程の分光研究

先端レーザー開発研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

- 研究目的 分子科学研究のためのテラヘルツから軟X線にいたる先端光源の開発
- 研究課題 1 ,マイクロチップレーザー , セラミックレーザー , 高機能非線形波長変換など , マイクロ固体フォトリソグラフィの研究
- 2 ,レーザーと加速器を組み合わせた新光源開発

超高速コヒーレント制御研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

- 研究目的 高出力超短パルスレーザーを用いた量子制御法の開発
- 研究課題 1 ,振幅と位相をデザインしたレーザー場による超精密コヒーレント制御法の開発

極限精密光計測研究部門（分子制御レーザー開発研究センター）

研究目的 高分解能分光法やナノ領域顕微分光法による分子とその集合体の精密構造研究法の開発

- 研究課題
- 1 ,高分解能分光法による分子の精密構造解析
 - 2 ,ナノ領域顕微分光法による原子・分子集合体の微細光学解析

物質分子科学研究領域

研究目的 新たな現象や有用な機能の発見を目指して、新規分子・物質の開発やそれらの高次集積化と、電子・光物性、反応性、触媒能、エネルギー変換などの研究を行う

電子構造研究部門

研究目的 新規な構造を有する金属 - 炭素結合体の開発によるその特異な電子構造特性を生かした機能の発現を実現する。また、磁気光学分光法による薄膜表面磁性の評価を行う。

- 研究課題
- 1 ,金属アセチリドの特性を生かした機能性新規ナノ構造体の開発
 - 2 ,グラフェン壁を持つ多孔性電気伝導体の開発
 - 3 ,放射光やレーザーを用いた新規磁性薄膜の磁気特性評価、表面分子科学的磁化制御、ならびに紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の開発
 - 4 ,高効率分子変換を実現する新規触媒表面の設計と触媒作用の解明

電子物性研究部門

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

分子機能研究部門

研究目的

- 1 ,生体分子および分子材料を対象とした固体高分解能 NMR 新規測定法の開発
- 2 ,高分子化学、超分子科学等の分子科学関連分野の諸問題を構造と機能という観点から研究

- 研究課題
- 1 ,脂質結合型水和生体分子を対象とした新規固体 NMR 測定法の開発と適用および分子材料の固体高分解能 NMR による局所構造解析
 - 2 ,多核金属集積体を用いたスピン空間の精密構築と新規 共役電子系の構築とその機能

物質分子科学研究部門（客員）

研究目的 物質分子科学の関連領域との交流を通して新しい先端的研究分野の開拓を目指す

- 研究課題
- 1 ,分子クラスター電池の基礎科学と応用展開
 - 2 ,分子性磁性体・伝導体の低温熱測定による電子物性研究
 - 3 ,水素結合および金属溶媒和クラスターの分子間相互作用とダイナミクスの分光学的研究

ナノ分子科学研究部門（分子スケールナノサイエンスセンター）

研究目的 単一分子から少数分子系での物性化学の確立を目指す。また、物質変換・エネルギー変換の為の新規なナノ構造体や分子系の創成と新しいナノ計測手法の開発を行う。

- 研究課題
- 1 単一分子で機能を持つ有機分子の設計・合成、およびその電気・光物性の計測
 - 2 有機トランジスタ用のn型半導体の開発及び有機太陽電池の材料開発
 - 3 人工分子を用いた光合成型物質変換系の構築
 - 4 非平面共役化合物「バッキーボール」の新規合成法の開拓と金属ナノクラスター触媒の開発
 - 5 有機半導体の物性物理学の確立と高効率有機薄膜太陽電池の開発

ナノ計測研究部門（分子スケールナノサイエンスセンター）

研究目的 光や電子線，X線等を用いた新しいナノ計測手法の開発とそれを用いたナノ分子科学の最先端研究を展開する

- 研究課題
- 1 新しいイメージング計測手法の開発
 - 2 ナノスケールの新しいイメージング手法を用いた新物質系の開拓やナノバイオ研究の新展開を図る

ナノ構造研究部門（分子スケールナノサイエンスセンター）

研究目的 ナノ構造体の電子状態と物性との関連を明らかにして新物質系の開拓を目指すとともに、物質変換の為の新規なナノ構造体/ナノ触媒を創成する

- 研究課題
- 1 ナノ構造物質における電子・核ダイナミクスの理論的・数値計算的研究
 - 2 両親媒性高分子に錯体触媒，ナノ触媒，不斉触媒などを固定化し水中不均一系で機能する触媒の開発
 - 3 金属クラスターの精密合成と構造解析および金属クラスターの光学特性と触媒機能評価

先導分子科学研究部門（客員）（分子スケールナノサイエンスセンター）

研究目的 タンパク質，複合糖質をはじめとする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 超高磁場 NMR 法の生体高分子高次構造解析への応用，複合糖質およびタンパク質の精密立体構造解析

生命・錯体分子科学研究領域

研究目的 生物が示す多彩な生体機能の発現が、どのような機構で行われているか分子レベルで解明するための研究を行う。中心金属と配位子の組み合わせで金属錯体が発現する多種多彩な機能を生かしてエネルギー・環境問題軽減のための高効率エネルギー変換，水中での有機化合物の分子変換，無機小分子の活性化を行う。

生体分子機能研究部門

研究目的 アミノ酸配列から蛋白質の立体構造が形成される過程(フォールディング)の分子機構を含めて、生物が示す多彩な機能の発現を種々の研究手法を駆使することで、その詳細な分子機構を明らかにするとともに、金属酵素がもつ特色のある反応場を、活性中心モデル錯体から解明し、既知の金属酵素の機能改質や人工酵素、機能性触媒などの新規物質の開発を進める

- 研究課題
- 1 ,新規な機能を有する金属タンパク質の構造機能相関解明
 - 2 ,In vitro の蛋白質フォールディングの熱力学と速度論
 - 3 ,蛋白質の細胞内フォールディングを介助する分子シャペロンの作用機構
 - 4 ,金属酵素による酸素分子活性化機構
 - 5 ,窒素循環サイクルに関わる金属酵素の分子機構

生体分子情報研究部門

研究目的 神経細胞ネットワーク機能解析素子開発、細胞内プローブ分子開発、細胞膜表面反応解析などの研究をとおして、生体内での情報機能分子の構造と機能を調べる

- 研究課題
- 1 ,神経細胞ネットワーク機能解析素子開発
 - 2 ,人工細胞膜の構造と物性および関連病原体分子の構造と機能
 - 3 ,細胞内情報システムプローブ分子開発

錯体触媒研究部門

研究目的 分子間の共同作用的相互作用に立脚した化学反応の駆動、化学反応システムの構築

- 研究課題
- 1 ,水中での疎水的相互作用による有機分子変換触媒システム構築
 - 2 ,分子集合挙動に基づく超分子触媒、高次構造触媒の設計と創製

錯体物性研究部門

研究目的 金属錯体を反応場とした化学エネルギーと電気エネルギーの相互変換と小分子の新しい反応性の開拓

- 研究課題
- 1 ,配位子設計に基づく金属錯体の反応制御
 - 2 ,金属錯体による小分子の活性化
 - 3 ,二酸化炭素の6電子還元反応
 - 4 ,メタノールの6電子酸化反応

生命・錯体分子科学研究部門(客員)

研究目的 生物無機化学的な観点から生体系での酸素酸化によるエネルギー代謝機構の解明

- 研究課題
- 1 ,金属-酸素錯体の反応性の解明
 - 2 ,酸素添加と酸素呼吸の酵素モデルの合成