

3-1 研究領域

理論・計算分子科学研究領域

- 研究目的 分子及びその集合体（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及び機能を量子力学，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 ,凝縮重系の新規電子状態の解明とその方法論開発

理論分子科学第二研究部門

- 研究目的 分子性固体の構造，物性及び非平衡過程に関する理論的研究
- 研究課題 1 ,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
2 ,外場誘起非線形現象，秩序形成及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 分子及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に関する理論・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（若手独立フェロー）

- 研究目的 多重階層分子システムの物性と動力学に関する理論・計算科学的研究
- 研究課題 1 ,ミクロスケールとマクロスケールをつなぐ理論基盤の探索
2 ,分子及び分子集合体における光物性の理論的研究
3 ,凝縮相化学反応過程の量子動力学理論
4 ,分子システムの環境適応性の分子理論

理論・計算分子科学研究部門（客員）

- 研究目的 1 ,複雑分子系の電子状態と化学反応に関する理論的研究
2 ,分子及び分子集合体における量子移動過程に関する理論的研究
3 ,分子動力学（MD）計算によるナノ物質の物性解明および新しいMD手法の開発

- 研究課題
- 1 ,凝集系における分子の励起状態を記述する波動関数理論の開発
 - 2 ,酵素と触媒の反応機構に関する理論的研究
 - 3 ,生体分子における長距離電子移動経路解析
 - 4 ,水素ダイナミクスにおける量子効果の理論とシミュレーション
 - 5 ,MD 計算における自由エネルギー計算手法の改良とナノ物質への応用

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、並びに、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・分子及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及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

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 「フォトリック結晶」「フォトリックナノ構造」の物理的基礎と応用
 2 ,放射光X線を用いた表面化学反応の研究
 3 ,放射線の生物作用におけるフリーラジカルの研究
 4 ,X線顕微鏡の開発とその生物観察への応用

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・テラヘルツ分光及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ックスの研究
 2 ,中赤外から真空紫外まで同時に発生する超広帯域フェムト秒パルス光源の開発
 3 ,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 表面の物理的・化学的新機能とその機構解明

研究課題 1 ,表面科学的制御を基にした新奇磁性薄膜の創製・評価と新しい磁気光学測定手法の開発

2 ,表面を媒体とした新しい金属錯体触媒構造の創出と選択触媒反応制御

電子物性研究部門

研究目的 分子性固体の物性と機能

研究課題 1 ,分子を使った新しいエレクトロニクスの開発

2 ,分子性固体の磁気共鳴研究

分子機能研究部門

研究目的 生体分子・高分子・超分子の構造と機能

研究課題 1 ,生体分子の構造・物性解析のための固体核磁気共鳴法の開発

2 ,二次元高分子の創製

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じた新しい先端的研究分野の開拓

研究課題 1 ,有機電荷移動錯体における電気伝導特性および磁気特性への光照射効果

2 ,ポリラジカルのスピン整列に基づく未開拓物質分子群の創製

3 ,自己会合型金属錯体などの超分子系が示す分子磁性

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 物質変換・エネルギー変換のための新規ナノ構造体やデバイスの創製

- 研究課題
- 1 ,有機薄膜太陽電池
 - 2 ,プラスチックエレクトロニクスのための有機半導体の開発
 - 3 ,人工分子で光合成系を組み立てる
 - 4 ,ナノサイズのお椀と粒 : 「パッキーボウル」と「クラスター触媒」

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 光や電子線を用いた新しいナノ計測手法の開発
- 研究課題
- 1 ,新しいイメージング等の分光計測法の開発

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・生体分子の物性や機能の解明
- 研究課題
- 1 ,ナノ構造物質における大規模電子状態理論計算
 - 2 ,分子触媒や生体分子の構造と機能

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 生体分子の構造と機能

生命・錯体分子科学研究領域

- 研究目的 生体系が示す多種多彩な機能の発現が、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。また、生体分子を利用した新たな分子デバイスの開発も行う。中心金属と配位子の組み合わせで金属錯体は多彩な機能を発現する。新しい錯体合成法を開発することで新たな結合構造を持つ金属錯体を創製し、その機能を開拓する。また、金属錯体の特性を生かしてエネルギー・環境問題軽減のための高効率有機化合物変換反応、水中での有機化合物の分子変換、無機小分子の変換と機構解明を行う

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
 - 6 ,複合糖質およびタンパク質の構造・ダイナミクス・相互作用に関する研究

生体分子情報研究部門

研究目的 溶液散乱と結晶構造解析を相補的に駆使した動的構造解析，また赤外，可視，蛍光等の分光法と表面増強効果あるいは顕微計測技術を組み合わせた新規計測法の開発により，生物時計システムや細胞内情報伝達を担う膜タンパク質の分子機構を解明する

- 研究課題
- 1 ,タンパク質時計の計時機構解明
 - 2 ,溶液散乱と結晶構造解析を相補的に駆使した動的構造解析
 - 3 ,赤外差分光計測による膜タンパク質の構造機能相関解明
 - 4 ,低収量生体分子の時間分解計測を目指したマイクロ流体ミキサーの開発
 - 5 ,イオンチャネル及び G 蛋白質共役型受容体の機能的発現と分子機構解析

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 新しい結合構造を持つ金属錯体の設計と合成，金属錯体を反応場とする有機分子や無機分子の高効率変換

- 研究課題
- 1 ,新しい結合構造を持つ無機，及び有機金属錯体の合成と構造解明
 - 2 ,有機金属錯体の素反応機構解明
 - 3 ,金属錯体を用いた小分子の高効率変換反応の開発
 - 4 ,エネルギーの高効率利用を指向した金属触媒反応の開発

生命・錯体分子科学研究部門（客員）

研究目的

- 1 ,金属と有機配位子により高機能錯体触媒やナノ多孔性金属錯体を合成し，それらを合成場や集積場として複素環の直接化学修飾や高分子材料の精密構造制御合成を行う
- 2 ,レチナールを発色団とした光受容分子の機能発現機構の解明とそれを基盤とした光操作ツールの開発

- 研究課題
- 1 ,レチナールタンパク質分子の単離・精製・分光解析と，同タンパク質分子による細胞・個体の光操作
 - 2 ,金属錯体を用いた新規 C-H 結合活性化反応の探索並びに金属錯体ナノ空間を用いた精密高分子合成