

## 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，生体分子やナノ物質などの多体化学系の構造，反応，物性，機能について量子力学，統計力学などに基づく理論・計算分子科学研究により解明する

#### 理論分子科学第一研究部門

研究目的 多体分子系の反応ダイナミクス，物性，機能の解明のための方法論の開発とそれに基づく理論・計算科学的研究

- 研究課題
- 1 ,凝縮系における不均一な構造遍歴ダイナミクスおよび機能発現の理論的研究
  - 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 ,凝縮重系の新規電子状態の解明とその方法論開発

#### 計算分子科学研究部門

研究目的 機能性分子や不均一触媒系，さらに生体分子などの電子状態や構造の解明のための方法論の開発とそれに基づく理論・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 ,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 ,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、X線顕微鏡の開発とその生物観察への応用
- 3、X線自由電子レーザーの測定システムの開発とその分子科学への応用
- 4、高強度テラヘルツ光の発生とその分子科学研究への応用

#### 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ソの研究
  - 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 分子及びその集合体を示す新たな現象や有用な機能の発見を目指し、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。また、分子・分子集合体の物性・機能の起源を解明するため、主として分光法に基づいた新たな観測技術開発に努める

### 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 ,物質科学・表面科学のための新しい分光学的計測手法の開発  
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 ,分子性固体の磁気共鳴研究  
2 ,分子を使った新しいエレクトロニクスの開発

### 分子機能研究部門

- 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・高分子・超分子およびデバイス創製，生体分子の構造と機能
- 研究課題 1 ,有機薄膜太陽電池  
2 ,機能性二次元・三次元高分子の創製  
3 ,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

### 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 ,核磁気共鳴を用いた絹の精密構造解析と再生医療材料設計  
2 ,新奇有機機能性材料の開発・基礎物性研究ならびにデバイスへの応用  
3 ,有機半導体導電キャリアの電子スピン共鳴

## 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** 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 ,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
  - 3 ,金属酵素による酸素分子活性化機構
  - 4 ,窒素循環サイクルに関わる金属酵素の分子機構
  - 5 ,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 ,赤外差分計測による膜タンパク質の構造機能相関解明
  - 4 ,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 ,水中での疎水の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 ,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  
2 ,レチナ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

#### 協奏分子システム研究センター

- 研究目的 分子を軸足に「個」と「集団」を結ぶロジックを確立し，その原理をもとに斬新な分子システムを創成する

#### 階層分子システム解析研究部門

- 研究目的 個々の分子の動態が分子間相互作用や複雑な制御ネットワークを介して多重の階層を貫き，分子システムとしての卓越した機能へ繋がっていく仕組みの解明
- 研究課題 1 ,生物時計タンパク質が 24 時間周期のリズムを奏でる仕組みの解明  
2 ,分子時計システム研究のための研究基盤構築  
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物理化学理論  
5 ,量子トンネル現象の原理的理解に関する研究  
6 ,多数の分子の究極測定理論と情報との関係に関する研究  
7 ,酸水素化物を基本とした新規機能性材料の探索  
8 ,電極 / 電解質界面の制御によるリチウム二次電池の高性能化  
9 ,生体分子系における反応および階層的構造変化の解明  
10 ,赤外分光法を基軸とした協奏分子システムの動的構造変化の解析

#### 機能分子システム創成研究部門

- 研究目的 機能性新分子の合成と、その複合化による創発的分子ナノデバイスの創成
- 研究課題
- 1 ,機能性分子の多重集積化による新規機能性分子デバイス
  - 2 , 共役系有機化合物と金属クラスターとの複合化による新型有機金属化合物
  - 3 ,ナノサイズのお椀と粒:「バッキーボール」と「ナノクラスター触媒」
  - 4 ,ナノスケール曲面を有するグラフェン半導体分子
  - 5 ,金属錯体を触媒とする酸素発生・光水素発生・二酸化炭素還元とその反応場形成

#### 生体分子システム研究部門

- 研究目的 生物が示す多彩な生命現象の分子レベルでの解明
- 研究課題
- 1 ,新規な機能を有する金属タンパク質の構造と機能
  - 2 ,超高磁場 NMR を機軸とする生命分子のダイナミクスの探究
  - 3 ,タンパク質分子が相互作用する際の認識, 情報伝達, 機能制御及びそのための実験・理論的手法の開発
  - 4 ,金属酵素の機能発現の分子メカニズムの解明