

## 3-1 研究領域

### 理論・計算分子科学研究領域

研究目的 量子力学，統計力学などに基づく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，機能に関する理論・計算分子科学研究による解明

#### 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・計算科学研究

研究課題 1 ,凝縮系における不均一な構造遍歴動力学および物性・機能発現の解明  
2 ,ナノ構造体の光応答理論と機能性物質理論設計への展開  
3 ,有機分子・錯体分子の電子状態の解明とその量子化学理論の開発

#### 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・計算科学研究

研究課題 1 ,電子状態理論の開発と光物性科学・不均一触媒系への応用  
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 ,複雑な励起状態のための理論開発と応用  
2 ,生体分子の機能に関係する柔らかいコンフォメーション動力学の理論・計算研究  
3 ,電子状態シミュレーションと情報化学手法を駆使した物質の構造 - 機能相関に関する理論的研究

研究課題 1 ,決定論と確率論を融合した電子状態理論の開発  
2 ,高効率光エネルギー変換に関する理論的研究  
3 ,基質・リガンド結合に伴う生体分子系の大規模構造変化についての MD 計算等による解析  
4 ,蛍光プローブ分子の構造 - 機能相関の解明と分子設計  
5 ,エネルギー変換用複合分子システムの構造 - 機能相関の解明とシステム設計

### 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

#### 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子分光法の開発研究を行う

- 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ーの研究  
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が見出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

#### 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

#### 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 ,有機材料と電気2重層を用いた電界誘起相転移の探索  
2 ,新奇有機機能性液体材料の開発および光・磁気物性解析  
3 ,新規機能性金属ナノクラスターの創製

#### 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。さらに，人工細胞を創成して生物の挙動を再現することを目指した研究を展開する。

#### 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 ,タンパク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 ,金属酵素モデル錯体による酸素分子活性化機構  
4 ,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  
5 ,交差触媒システムを内包する人工細胞の構築と解析

#### 生体分子情報研究部門

研究目的 先端計測技術により、細胞内情報伝達を担う生体分子の分子機構を解明する

- 研究課題
- 1 ,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
  - 2 ,各種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
  - 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 ,イオンチャネル及び G タンパク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 ,水素結合・疎水性相互作用・静電的相互作用といった非共有結合性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 機能性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 ,機能性金属錯体の合成と構造解明
  - 2 ,金属錯体を用いた小分子の高効率変換反応の開発
  - 3 ,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 ,遷移金属触媒や典型元素の特性を活かした新反応・新分子の創出とそれに基づく新概念の確立や有用分子の効率的合成法の開発

- 2 ,光の創成と利用に資する光機能性金属錯体の開拓
- 3 ,光応答性タンパク質の励起状態プロトン移動の解析と新規蛍光性タンパク質の開発

研究課題 1 ,パラジウムやニッケル触媒を用いる含窒素巨大電子系分子の創出ならびに炭素-硫黄結合の触媒的活性化

- 2 ,発光性クロミック白金錯体、元素活用型発光性 3d 金属錯体、および、金属錯体光触媒系の構築と構造、物性、機構解明
- 3 ,光応答性タンパク質 Photoactive Yellow Protein のクマリン誘導体を用いた再構成と発光特性の評価

#### 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 ,タンパク質分子構造および機能の合理デザイン
  - 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 ,ナノスケール曲面を有するグラフェン半導体分子
  - 4 ,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 ,生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明