

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・計算科学的研究
- 研究課題 1, 凝縮系における反応・構造変化動力学と物性・機能発現の解明
2, ナノ構造体の光応答理論の開発と光・電子融合機能物質の理論設計
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

理論分子科学第二研究部門

- 研究目的 主として量子科学技術・統計物理学に立脚した凝縮相分子系における動的現象および機能発現の理論計算研究
- 研究課題 1, 凝縮相化学過程の量子ダイナミクス理論
2, 量子光学的知見に基づく分子分光理論

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, 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（若手独立フェロー）

- 研究目的 1, 分子集合体の光電子物性とダイナミクスに関する理論・計算科学的研究
2, 生体分子マシンの機能ダイナミクスの理論・計算手法による解明と，そのデザイン原理の探求
- 研究課題 1, 大規模系のための励起状態計算手法の開発
2, 有機／有機界面の電荷移動状態の解析
3, 生体分子マシンの機能ダイナミクスの全原子・粗視化 MD 計算による解析
4, 一分子実験・MD 計算データの統計力学的モデリング

理論・計算分子科学研究部門（客員）

- 研究目的 1, 複合光応答をする分子の光物性の理論計算
2, 分子の量子動力学計算のための理論開発と応用
3, 水界面におけるミクロな構造とそのダイナミクスに関する研究

- 研究課題 1, 3重項-3重項消光に基づくアップコンバージョン機構の理論解析
2, 動的な厳密有効ポテンシャル理論の開発
3, グラフェンを使った水の浄化の研究

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、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 原子や比較的簡単な分子から、それらの集合体、固体表面に吸着した原子・分子やナノ構造体、さらに生体分子までを広く対象とし、高度な周波数・時間・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等によりそれらの性質を明らかにする
- 研究課題 1, 強相関・極低温リユードベリ原子気体を用いた超高速・多体電子ダイナミクスに関する研究
2, 光電子分光法によるトポロジカル物性の研究
3, 局所分光法による有機薄膜電子状態の次元依存性に関する研究

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の高性能化のための電子ビーム・光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, 光ビーム計測・制御技術に関する開発研究

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

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・生体分子等の物性・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 分子・物質材料の物理的・化学的新機能と機構解明

- 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 分子集合体・生体分子の物性と機能

- 研究課題 1, 開殻系分子集合体や生体分子の磁気共鳴研究

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, 固体 NMR を用いた生体分子・分子材料の構造・物性解析

物質分子科学研究部門（客員）

研究目的 物質分子科学のコミュニティ交流を通じた新しい先端的研究分野の開拓

研究課題 1, 有機系熱電材料とフレキシブル熱電変換デバイス

2, 分子性材料を電極とする二次電池の開発

3, ディラック電子系有機導体をチャネルとした FET 製作と量子輸送

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 タンパク質や複合糖質等の生体分子が示す多彩な機能発現の詳細な分子機構を明らかにするとともに，生体分子や人工細胞の設計・創成を行う

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, 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

3, 生体分子モーターのエネルギー変換機構の解明，新規設計と実証

4, 合成両親媒性分子を用いたベシクル型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, 有機金属錯体触媒における反応中間体錯体と反応生成物との相関性を評価する手法の確立
- 2, 生体触媒の基質特異性変換による高難度物質変換
- 3, 酵素タンパク質の超分子複合体形成による効率的な細胞内連続化学反応の分子機構の解明
- 研究課題 1, 不斉ニッケル触媒による反応中間体錯体と鏡像体過剰率との相関に関する研究
- 2, 基質類似物質による酸化酵素の活性化とガス状アルカン水酸化
- 3, 嫌気呼吸に関わる酵素タンパク質の複合体形成とその機能的意義の解明

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, 量子トンネル現象の原理的理解に関する研究
- 4, 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
- 5, 酸水素化物を基本とした新規機能性材料の探索
- 6, 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
- 7, 生体分子系における反応および階層的構造変化の解明
- 8, 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, ナノスケール曲面を有するグラフェン半導体分子
3, 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

メゾスコピック計測研究センター

- 研究目的 分子が集まって機能するシステムにおいて特性発現に役割を担う、ミクロとマクロを繋ぐ階層間の情報・物質のやりとりの現場を、できる限りありのままの姿で捉え、新しい分子の能力を引き出すための極限的計測法の開発とその利用研究を行う

物質量子計測研究部門

- 研究目的 精密な光観測・制御法を先鋭化し、新しい量子相を作り出して制御し、量子情報処理など新規な分子の能力を引き出す
- 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
2, ナノ構造体の光応答理論開発と多階層系の特性解析、光・電子機能物質の理論設計

組織計測研究部門

- 研究目的 低摂動で組織な分子計測法等、分子のありのままの姿を非破壊的に観測する計測手法を開発し、分子物質の機能を解明
- 研究課題 1, 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
2, 極限的計測法のための新レーザー光源、高機能非線形波長変換など、マイクロ固体フォトリクスの研究

広帯域相関計測解析研究部門

- 研究目的 多変数計測解析手法、高分解能広帯域計測法とその解析法を開発し、分子の能力とそれを司る物理過程の解析を展開
- 研究課題 1, 生体分子モーターのエネルギー変換機構解明のための新計測法開発
2, サブサイクル超短光パルス発生装置、光パルス評価法、超高速分光装置の開発