

2-5 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，計算・情報科学に基づき，分子および凝縮系における構造，反応，物性，機能の解明を目指す理論および方法論の開発と，それらの応用研究

理論分子科学第一研究部門

研究目的 凝縮系における反応ダイナミクス，物性，機能の解明のための理論・計算科学的研究

研究課題 1，凝縮系における反応，物性，機能発現の理論研究

理論分子科学第二研究部門

研究目的 量子化学計算と機械学習の融合による機能性材料の理解と設計に関する理論・計算科学的研究

研究課題 1，機能性材料の反応経路のデータベース化と機械学習への応用

計算分子科学研究部門

研究目的 機能性分子，不均一系触媒，生体分子マシン等の電子状態や構造・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，電子状態理論の開発と光物性科学・不均一系触媒への応用
2，生体分子マシンにおける機能発現ダイナミクスの解明
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 量子コンピュータに関する基礎および応用研究と複雑な電子状態に対する基礎理論開発

研究課題 1，誤り耐性量子コンピュータとその物理シミュレーションへの応用に関する理論的研究
2，特異な量子効果を含む電子状態を記述する理論の開発と実在系への応用
3，相対論的電子状態理論の開発と応用

光分子科学研究領域

研究目的 様々な物質の構造や性質を光で調べることで，物性や反応を光で制御すること，及びそれに必要となる高度な光源を開発することを目的とする

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，微粒子系における励起状態と増強電場の研究，およびナノ・マイクロ物質のキラリティとキラル光学効果に関する研究

光分子科学第二研究部門

- 研究目的 物質の量子力学的な性質を、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、および超高速量子シミュレータ・量子コンピュータの研究開発

光分子科学第三研究部門

- 研究目的 新奇な分子機能の開拓と、それに関する動的プロセスの解明及び制御のための新しい方法論の開発を目指した研究を行う
- 研究課題 1, 真空紫外光・軟X線分光による分子あるいは低次元物質の表面・界面における物性研究

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, 電気化学反応や触媒反応の変換場における局所構造と電子状態の研究
2, データ科学を活用した放射光光電子分光の計測と理論の研究

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とその利用に関する研究

電子ビーム制御研究部門（極端紫外光研究施設）

- 研究目的 光源の高性能化あるいは高度利用のための開発研究を行う
- 研究課題 1, 電子または光ビーム計測・制御技術に関する開発
2, 放射光を用いた新規分析法の開発研究

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, 分子固体・液体の化学状態の分光研究

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
 - 2, 新規分光法による固体表面界面における分子集合体の特異的な構造物性・化学機能・量子ダイナミクスの探求
 - 3, 有限の厚さをもつ固液界面のオペランド分子科学研究

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, 無機薄膜を活用した物質・界面における新奇電子物性・イオン輸送特性の探索
 - 2, 原子層ナノ材料の構造設計に基づく電子光学物性制御と光機能の創出

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, 固体 NMR 新規測定法およびハードウェアの開発

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, 動的電子状態制御に基づく分子スピン Qubit の合理的分子設計
 - 2, 炭素資源循環に資する高機能不均一系触媒の開発
 - 3, 分子性強相関物質を用いた相転移デバイスの研究

生命・錯体分子科学研究領域

研究目的 新規な光学的・電気的特性や高効率な物質変換・エネルギー変換を目的とした新たな分子や分子集合体、化学反応系の設計・開発を行うとともに、多様な計測法を駆使して錯体、キラル分子、共役系分子、生体分子およびそれらの集合体が示す高次機能や協同現象に対する分子レベルの機構解明に関する研究を行う

生体分子機能研究部門

研究目的 タンパク質や複合糖質が示す機能発現の分子機構を明らかにするとともに、生体分子の設計・創成を行う

研究課題 1, 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
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

生体分子情報研究部門

研究目的 先端計測技術により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タンパク質の構造解析

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, 集積化芳香族化合物の設計と合成, 新規な物性, 機能の開拓

研究課題 1, 3次元幾何構造をもつ有機共有結合結晶の合成と機能解明

生命・錯体分子科学研究部門 (客員)

研究目的 広義の錯体を対象とした触媒機能, 反応性および構造の相関の解明, 分子科学的手法を用いた生命機能の解明

研究課題 1, 結晶スポンジ法, 拡張スポンジ法の開発と産業応用
2, DNA ナノテクノロジー法を用いた分子モーターのエネルギー変換機構の解明
3, 高反応性化学種を用いたタンパク質の化学修飾

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, 先端的分光法による複雑分子系の機能・構造・ダイナミクスの解明
 - 3, タンパク質分子構造および機能の合理デザイン
 - 4, 生体分子系における反応および階層的構造変化の解明

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

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・エネルギー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, 固体表面における分子集合体の特異的量子ダイナミクスの探究

繊細計測研究部門

研究目的 低摂動で繊細な分子計測法等，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, 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

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, 表面ナノ構造とその機能を解明するプローブ顕微鏡の開発