

理論研究系

分子科学は、量子力学・統計力学を中心とする理論の進歩に基づいて発展した。本研究系では、分子科学の基礎としての理論研究を遂行するとともに、所内外の実験研究者と密接に連携して、実験結果の解釈、新しい指針の提供をも行っている。理論計算には計算科学研究センターの大型計算機を使用し、同センターとはプログラム開発や数値計算に関して密接に協力しあっている。

分子基礎理論第一研究部門

1. 生体分子構造予測の理論的研究

計算科学的手法を用いて、蛋白質などの生体分子の立体構造予測に取り組んでいる。特に、拡張アンサンブルに基づくモンテカルロ法（例えば、マルチカノニカル法）や分子動力学法を使って、スーパーコンピュータ上のシミュレーションを行っている。これによって、シミュレーションがエネルギー極小状態に留まってしまうという、従来の方法の困難を回避している。計算手法の改良・開発とともに、エネルギー関数（特に、溶媒の寄与）の精度を上げる努力もしている。ランダムコイル状態の初期構造から特異的立体構造への蛋白質の折り畳みを計算機上で再現するとともに、その熱力学的原理を解明することを目指している。



（後列左から）
 桑 美和子、光武亜代理、
 杉田有治、西川武志
 （前列左から）
 長島剛宏、岡本祐幸、
 依田隆夫

分子基礎理論第二研究部門

1. 化学反応動力学と原子分子衝突過程に代表される分子の動的諸過程の理論的研究

新しい分子を作り出す化学反応はこの世の有為転変の根源である。その動力学機構の究明と基礎理論の開発が我々の研究課題である。具体的には、以下のような課題に取り組んでいる： 化学反応の起こりやすさを決めている因子の究明， 多自由度系の動力学を扱う理論の開発， 状態変化の基本メカニズムである非断熱遷移の理論の開発と応用， 超励起分子の特異な性質と動力学の解明， 多体系に現れる統計性と選択性の解明，及び 分子過程の新しい制御方法の確立。

最近の特筆すべき成果はLandau, Zener, Stueckelberg以来初めて非断熱遷移理論を完成した事であり、現在理論の更なる展開と応用を進めている。



（後列左から）
 神坂英幸、長屋州宣、
 三嶋謙二、PICH, Lukas
 （前列左から）
 BIAN, Wensheng、
 中村宏樹、朱 超原

(左から)

加藤 毅、日野 理、
谷村吉隆、鈴木陽子、
奥村 剛



量子化学計算など計算化学で用いられている手法などを用いる。

2. 分子諸物性における量子効果とそれに及ぼす散逸の影響の研究

化学反応過程、非断熱的遷移過程における量子効果と散逸の研究、溶液中の分子の構造と運動が光学過程に及ぼす影響の研究、分子集合体における光物性、磁気的性質、電子伝導などの研究、などを行っている。量子力学的Fokker-Planck方程式など非平衡統計力学などで用いられている手法や、経路積分法など場の量子論などで用いられている手法、

分子基礎理論第三研究部門（客員研究部門）

1. タンパク質の構造形成機構と立体構造予測に関する研究

主に計算化学的手法を用いてタンパク質の立体構造形成過程の理解と立体構造予測法の開発を目指している。特にタンパク立体構造のアミノ酸間平均距離統計から簡略化したアミノ酸間有効ポテンシャルを導出し構造予測に応用することを試みている。さらに、簡単なモデルを用いてタンパクのようなフラストレーション最小状態の形成機構についても研究を行っている。

2. 積分方程式論を軸にした物質複合系の非線形挙動の解明

複数の物質要素が混じり合う（あるいは接触し合う）と、各要素の挙動の重ね合わせからは想像もつかない非線形挙動が発現し得る。要素の1つが溶液である場合を特に取り上げ、溶液側に積分方程式論を適用し、他理論やモンテカルロ法などと統合させ、独自の複合理論を構築しつつ物質複合系の挙動解明を目指す。例題として、溶液中で生体高分子が取る立体構造、溶液中における微粒子間相互作用、金属-電解質水溶液界面の構造と性質、両親媒性分子の自己組織化によって形成される分子集合体の形態・サイズ分布に関する研究と取り組む。

分子基礎理論第四研究部門

1. 気相中では全く起きない反応が溶媒中では起きてしまう、あるいは、溶媒を変えると反応速度が大きく変化するという現象は実験化学者が日常的に経験していることである。生物体内の酵素の構造やそれによって触媒される化学反応も「水」という溶媒を抜きには考えられない。当グループでは溶液中の分子の電子状態、構造、反応性、反応速度などの化学的性質に溶媒がどのような影響を及ぼすかと言う問題を液体の統計力学に基礎を置く分子論の立場から解明しようとしている。イオンの周りの溶媒の揺らぎから蛋白質の立体構造まで広範な現象が研究対象となる。



(後列左から)
山崎 健、今井隆志、
今村主税
(中列左から)
佐藤啓文、平田文男、
秋山 良
(前列左から)
原野雄一、SETHIA, Ashok、
墨 智成

2. 有機導体や金属錯体化合物を含む多くの分子性固体では、電子的な低次元性とそれに伴う大きな量子揺らぎ、電子相関と電子格子相互作用の競合、電子バンドやd電子バンドの間の相互作用、バンド充填率のわずかな変化などによって、反強磁性、電荷/スピン密度波、スピン・パイエルスなどの絶縁相、低次元金属相、超伝導相などの多様な電子状態が現われる。これらの磁性、伝導性、光物性、格子物性を物性理論を基礎に解明し、次元性と電子相関がもたらす新しい電子状態やそれに対する分子の個性的な役割を探る。



(後列左から)
森 道康、桑原真人、
宮下尚之
(前列左から)
岸根順一郎、米満賢治

分子構造研究系

本研究系は構造から出発して分子のもつ諸性質を明らかにすることを目指している。単一の比較的簡単な分子から複雑な生体分子までを広く対象とし、高励起状態や反応中間体など動的過程についても、構造論の立場から積極的にとりあげることにより、分子及び分子集合体のもつ様々な機能の解明に資する。

分子構造学第一研究部門

(左から)
森田紀夫、森脇喜紀



1. 光による気体原子の並進運動の制御や新しい運動状態の実現を目標として、レーザーによって原子をmK以下の極低温にまで冷却するレーザー冷却、及びレーザー光の中に原子を閉じ込めるレーザートラップの研究を行っている。

2. 液体ヘリウム中でバブルあるいはスノーボールを形成している原子やイオンの内部状態およびダイナミックスをレーザー分光学的に研究している。

分子構造学第二研究部門（客員研究部門）

1. 球形分子フラレンの化学は球面の外、内、球面上の三つに分類される。外側の化学としてフラレンの化学的修飾があり、内側の化学として金属を内包する金属フラレンの化学がある。また、炭素ケージ内に異原子が置換したヘテロフラレンの化学も存在する。このような三つに分類されるフラレンの化学を有機合成化学の立場から明らかにしていく。

2. 原子分子やイオンの運動をレーザー光で制御する研究が盛んに行われているが、そこではほぼ例外なく最低次のガウスモードの光ビームが用いられている。しかし、自由空間を伝搬する光ビームには、この他に、高次のエルミートガウスモード、あるいは高次のラゲールガウスモードがある。これらを使って光による冷却原子トラップやガイド、および、ラゲールガウスモードがもつ光の軌道角運動量の利用を研究する。

分子動力学研究部門

1. 振動分光学による分子動的構造の研究

振動分光学をシャープに生かして分子の構造と機能の関係を調べる研究をモットーとしている。時間分解共鳴ラマン散乱や時間分解赤外吸収を主たる実験手段とし、反応中間体や分子励起状態など、分子の動的構造と化学反応との相関の解明が実際のテーマ。時間領域はピコ秒からミリ秒にわたる。分子の振動緩和、タンパク質側鎖の速い構造変化やフォールディング/アンフォールディング、酵素による酸素活性化機構、タンパク質中のプロトン能動輸送機構、タンパク質高次構造変化によるアロステリック効果の発現や情報伝達機構の解明を中心課題としている。



(後列)
水谷泰久
(中列左から)
奥野大地、安藝理彦、
HU, Ying、野村恵美子
(前列左から)
長友重紀、北川禎三、
春田奈美

2. 凝集系の分子分光学研究

凝集系でしかできない分子分光学研究をめざしている。分子間相互作用や、分子内ポテンシャルに由来する動力学を電子スピン共鳴法や振動ラマン法で観測している。最近のターゲットは金属内包フラーレンのスピン状態、液晶分子の相転移、導伝性オリゴマーなど。



(左から)
鐘本勝一、加藤立久、
林 直毅、大窪清吾

電子構造研究系

電子構造研究系では、分子および分子の集合体がそれらの電子構造の違いによって多様な固有の性質を発現することに注目し、化学反応、電子移動、エネルギー移動、情報伝達などの分子機構を電子構造の立場から明らかにし、物質・エネルギー変換の分子論的基礎を確立することを目指している。

基礎電子化学部門

(後列)
中林孝和
(中列左から)
加茂 理、小杉健太郎、
寛 美知子、鈴木優子
(前列左から)
井口佳哉、西 信之、
日野和之



1. 溶液中のクラスター

水はそこに溶けている分子を組織化したクラスター構造に配列したり、逆に自身の構造を破壊することによって強い静電力を持つ分子を安定化し、この分子を核とする大きなクラスターを形成する。このようなクラスターは溶液の物性を決めればかりでなく、反応場を形成し、分子集合体の機能発現に重要な役割を果たす。このような機構を構造との関わりに注目して明らかにしている。

2. 分子クラスターイオンの電荷共鳴と電荷輸送

電子を持つ分子クラスターイオンにおける電荷の極在性、クラスター内の分子運動に同期した電荷のホッピング、赤外光による電荷分離と電荷移動の機構を、イオントラップ分光法、液体中におけるイオン生成に伴う超高速時間分解分光法等によって調べ、光によるナノスケールの電子輸送制御の可能性を探っている。

3. スーパークラスターの光合成と磁性、光計測

単分子でありながら極めて大きなスピン多重度を持つスーパークラスターを合成し、様々なクラスター分析の手法を動員して光によるその生成機構を解明し、実用可能な単分子磁石への道を探っている。

(左から)
鈴木優子、佃 達哉



4. ナノクラスターの創製と機能発現機構の解明

ナノメートルサイズの金属クラスターは、バルクの金属や原子とは異なる化学的・物理的な性質を持ったユニークな物質系である。まず、溶液中での金属クラスターの生成過程を追跡することによって、構造やサイズが揃ったクラスターの大量合成の方法の確立を目指す。また、調製したクラスターの反応性を調べ、幾何・電子構造との相関に注目しながら、

クラスターの機能が発現する機構を明らかにする。

電子状態動力学研究部門

1. イオン化検出赤外分光法による孤立分子・クラスターの高振動状態の研究

波長可変赤外レーザーで生じる振動励起分子を紫外レーザーにより選択的にイオン化して検出するイオン化検出赤外分光法により、孤立分子状態での高振動状態を観測する。さらに、高振動状態からの緩和過程（反応初期過程）や振動誘起反応の可能性を追求する。

2. パルス電場イオン化 (PFI ZEKE) 光電子分光法による分子カチオンの振動分光

高励起リユードベリ状態を電場イオン化して検出する高分解能光電子分光法（分解能 $\sim 10^{-4}$ eV）により、分子カチオンの振動回転構造を観測し、気相分子カチオンの分子構造と緩和過程を研究する。

3. 赤外 - 紫外二重共鳴分光法による分子・クラスターの構造とその動的挙動

凝縮相の一部である、気相分子クラスターに赤外 - 紫外二重共鳴分光法である IR-Dip 分光法を適用し、基底状態 (S_0)、電子励起状態 (S_1)、カチオン (D_0) さらには、光反応生成物の赤外スペクトルを観測する。振動スペクトル解析および Ab initio MO 計算との比較から、分子・クラスターの構造と動的挙動の関係を研究する。

4. 交差分子線画像観測法による化学反応動力学の研究

高分解能画像観測装置を組み込んだ交差分子線装置により、反応性散乱の微分散乱断面積を求め、量子化学計算で求められたポテンシャル曲面上での散乱計算と詳細に比較することにより、反応動力学を明らかにする。特に、成層圏オゾン層における化学反応を明らかにする目的で、O(1D)原子の反応について研究プロジェクトを進めている。

5. フェムト秒時間分解光イオン化法による化学反応の実時間追跡

フェムト秒時間分解光電子画像観測法により、孤立多原子分子や分子小集団における超高速位相緩和を実時間追跡し、非断熱動力学を明らかにする。



（後列左から）
酒井 誠、佐伯盛久、
渡邊武史、石内俊一
（前列左から）
藤井正明、稲垣いつ子



（後列左から）
坪内雅明、高口博志
（前列左から）
鈴木俊法、HOSSAIN, Delwar,
片柳英樹

電子構造研究部門（客員研究部門）

ヘテロポリ酸が金属酸化物の諸物性を分子論的に理解する上での格好の化合物であることに着目し、これを基盤とした分子素子の構築や無機医薬の実現に力を注いでいる。

1．ヘテロポリ酸の合成と構造化学（混合原子価状態，希土類金属等を含む種々のヘテロポリ酸の合成を行い化学構造を支配する構造化学的原理と電気および磁氣的性質との関連に関する詳細を求める。）

2．ヘテロポリ酸の光化学と応用（酸素 金属への電荷移動吸収帯の光励起により生ずる励起三重項状態の酸化還元反応やエネルギー移動の詳細を求め，触媒，EL素子，クロミック素子，発光素子，分子磁石等への応用を試みている。）

分子エネルギー変換研究部門（外国人客員研究部門）

分子及び分子集合体の性質とその機能をエネルギー変換の観点から広く研究する。そのため新しい物性をもつ物質系を斬新な手法を用いて合成・構築するとともに，その分子機能（光起電力，光触媒効果，表面電子移動，選択的触媒反応）発現の分子過程を分光学的手法等により研究し，化学的エネルギー変換の新しい原理を確立する。

分子集団研究系

分子集団研究系では新しい電子機能を持つ分子物質を設計，開発すると共に，電氣的，磁氣的，光学的実験や極低温，超高压等の条件下での種々の実験を通し，それらの新規物性の由来を解明する。これ等の研究を通し，分子物質の新物性の開拓と電子物性の統一的な理解，分子素子への展開を目指している。

物性化学研究部門

1. 分子性導体の物性研究と物質開発

伝導電子が局在スピンや分子内振動と強く結合している物質や電子同士が強く相互作用している強相関電子系と呼ばれる分子性導体について，偏光反射分光法やラマン分光法など主に分光学的な手法を用いて低温あるいは高压下の電子物性の研究を行っている。現在取り組んでいる研究課題は 金属フタロシアニン導体における電子-d電子相互作用の研究，赤外・ラマン分光法による分子導体における電荷整列の研究，偏光反射分光法による分子導体のバンド構造の研究，分子性導体における電子格子相互作用の研究などである。



(後列左から)
MAKSIMUK, M. Y.,
欧田 建勇、賣市幹大、
長谷川真史
(前列左から)
山本 薫、丁 玉琴、
中野千賀子、
DROZDOVA, O. O., 薬師久彌

2. 分子性導体の低温電子物性

分子性導体の示す特異な電子状態に関心を持ち，主に磁気共鳴 (ESR , NMR) といった実験手法により研究を行っている。現在，以下のテーマが進行中である。

選択的同位体置換した試料による NMR 精密測定。金属 - 非金属転移における絶縁化機構・電荷局在状態の理解。 ESR による伝導電子の同定，金属 - 非金属転移や電荷局在・スピンドYNAMICKS の理解。



(左から)
磯貝美穂、中村敏和、
塚田 浩

分子集団動力学研究部門

(後列左から)

緒方啓典、佐藤春菜、
大石 修、岡野芳則

(前列左から)

小島絵美子、藤原秀紀、
小林速男、田中 寿、
田村格良



新有機超伝導体の探索， 新規機能性液晶の探索， 複雑な構造を持つ分子性結晶の高圧単結晶 X線結晶構造解析， 超高圧下の電気伝導度精密測定法の開発， などである。

1. 分子性金属・超伝導体の開発・物性と高圧固体化学

私たちの研究室では新たな電子物性を示す分子物質の開発，構造，物性研究を一元的に行っている。現在の主なテーマは d 電子系による分子性磁性金属・超伝導体の開発と磁性と超伝導の共存・拮抗に伴う新現象の探索，有機安定ラジカルをスピン源とする有機磁性金属・超伝導体の設計と合成，単一構成分子による分子性金属結晶の開発，

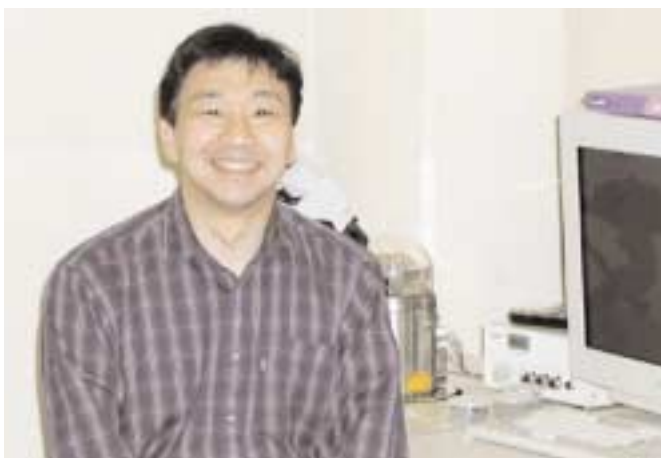
2. 分子集団系の配列・配向制御と局所電気特性の解明

単一分子あるいは数分子の集合体の電気特性を調べる。金属あるいは半導体基板上に，分子線エピタキシー法や電気化学的手法を用いて，分子を規則正しく配列し，走査型プローブ顕微鏡を用いてナノメートル領域での電気伝導度や，分子/基板界面の電子状態を明らかにする。

3. 分子素子の構築

上記知見に基づき，分子数個でスイッチングを行う素子を構築する。分子のデザイン・合成は，分子研の他のグループと協力して行う。分子へのナノサイズ配線を，リソグラフィ技術および無電解鍍金技術を用いて試みる。

夢田博一



分子集団研究部門（客員研究部門）

分子集団研究系と協力しながら，分子性金属・超伝導体，分子磁性体，有機磁性金属・超伝導体の構築，物性解明，分子磁性体のスピン構造，磁気特性の研究，極端条件下での分子性固体の研究を実施している。

相関領域研究系

本研究系では、分子科学と関連諸分野とが相関する領域を研究対象としている。有機化学、無機・錯体化学、さらには生体関連化学を視野の中に入れて広範な研究対象に関し、分子レベルでの新たなアプローチを目指している。

相関分子科学第一研究部門

1. ヘム蛋白質の構造、機能及び反応機構の解明

金属酵素の構造と機能発現機構解明を中心課題として取り扱っている。特に、ペルオキシダーゼやチトクロームP-450など酸化反応に関与しているヘム蛋白質の作用機構に関し、モデル錯体による不安定中間体の合成及び電子状態と反応性の定量化、蛋白質やミュータント、さらにはハイブリッド体を用いた研究を展開している。

特に、この課題では、酵素反応の作用機構を化学反応として精密に理解し、人工酵素の分子設計へと発展させることを目指している。



(後列左から)
鈴木和治、山原 亮、
原 功、上野隆司、
大橋雅卓
(中列左から)
楊 慧君、安 光賢、
岸田三省、渡辺芳人、
小江誠司
(前列左から)
牧原伸征、油 努、
中井英隆、谷澤三佐子、
加藤 茂

2. 分子性磁性体の開発及び物性研究

有機ラジカルと遷移金属からなる無機・有機ハイブリッド系を用いた新しい分子性強磁性体の構築研究及び、有機ラジカルのスピン間相互作用の研究を行っている。では配位子として高スピンのポリニトロキシドラジカルを用い、遷移金属イオンを介して自己組織化するという新しい分子磁石の構築方法を用いて高温の転移温度を持つ分子磁石や、キラルな分子磁石の構築研究を進めている。では新規安定ラジカル結晶の磁性を詳しく解析することにより分子間のスピン磁気モーメントの相互作用について研究を行っている。



(後列左から)
加藤恵一、井上克也、
今井宏之
(前列左から)
細越裕子、秋田素子
(池中左から)
岩堀史靖、鈴木健太郎

相関分子科学第二研究部門（客員研究部門）

色々な金属イオンを利用している金属酵素の構造と機能の理論を目指し、合成モデル系の構築を中心に研究の展開を行う。

分子クラスター研究部門（流動研究部門）

（後列左から）

蔡 徳七、西山裕介、
橋之口道宏、市川真史

（前列左から）

太田明代、笠井俊夫、
久保 厚



1. 新規な分子クラスターの構造選別と立体反応ダイナミクス解明

分子の配向は化学反応において制御すべき、最後に残された重要な自由度です。分子線レーザー蒸発法により有機金属錯体など新規な中性クラスターを合成し、六極電場法を用いてそのサイズと構造を非破壊的に選別し、引き続きクラスターの配向制御を行います。一方、偏向レーザー励起法によりラジカル・分子のアライメントを行い完全配向状態下の

反応を実現します。さらに $AB + CD$ 二分子反応の遷移状態化学種 $[AB \cdots CD]$ の幾何構造は反応分岐を決定する要因であるので、この構造選別を行い反応の Active Control を試みます。これらの研究から新しい化学反応論の新展開と近い将来の反応制御の新しい方法論の確立を目指します。

2. 固体高分解能 NMR による微粒子の研究

ラジオ波波形制御により金属微粒子の Knight シフトで広がったスペクトルの選択された帯域を励起し、溶液で使用されている 2 次元 NMR の実験に対応する実験を行い、表面の原子と内部の原子の J 結合等を決定する予定。また微粒子あるいは多孔質物質の固体表面と液晶や界面活性剤分子との相互作用を体積磁化率効果等を使って調べる。光を照射すると金属微粒子の集合体は非線型光学効果を示すがその 1 種である逆ファラデー効果や光整流効果が NMR で検出可能か否かを検討する。

（後列左から）

野口博司、野坂 誠

（前列左から）

高須昌子、橋本昌人



3. ゲルの生成過程、ヘリウムのランダムポテンシャル中の物性のシミュレーション

当研究室では、物性物理学の興味深い問題に対して、モンテカルロ・シミュレーションなどの手法を用いて研究している。特に、ゲルの生成過程に関してモデルを作成し、ラジカル、モノマー、リンカーの比率による、ネットワークのでき方の違いを調べて、相図を得る。その他、ヘリウムのランダムな媒質中での超流動

密度の変化や、雪崩現象のセルオートマトン・モデルによる研究も行っている。

極端紫外光科学研究系

本研究系は、極端紫外光実験施設（UVSOR）のシンクロトロン放射光やレーザーを用い、極端紫外光科学の新分野を発展させる中核としての役割を果たす。特に、光化学の基礎過程、反応動力学、界面の性質および触媒作用などの研究を新しい実験手法の開発とともに推進する。

基礎光化学研究部門

1. 軟X線光物性・光化学：内殻励起のダイナミクス

軟X線と分子の相互作用の基礎過程を研究している。特に、UVSOR施設からの放射光軟X線を利用して、分子の内殻電子を励起・イオン化し、そのダイナミクスを調べている。内殻電子は原子に局在しており、同じ元素であっても化学結合の違いによってエネルギーレベルが異なる。そのため、分子内の個々の原子を選択的に励起・

イオン化できる。このような特徴を生かして、価電子励起・イオン化では知られていないような新しい現象を探索し、また、その現象のメカニズムを解明している。さらに分子の物性評価に応用できる新しい内殻分光法も開拓している。



（左から）
永園 充、小杉信博、
陰地 宏、高田恭孝、
中根淳子

2. 超高速分光による分子ダイナミクスの研究

凝縮相（主として溶液中）での光化学反応、緩和過程、振動コーレンス等の分子のダイナミクスを時間分解分光を用いて研究する。現在は、ピコ秒・フェムト秒レーザーを用いた紫外・可視・赤外吸収分光、蛍光分光、線形・非線型ラマン分光を駆使して実験を行っている。既存の分光法の応用にとどまらず、新しい手法（方法論）

の開発を目指す。また、レーザーのみでは行うことが難しいエネルギー領域への時間分解測定の拡張という観点から、放射光を用いた実験にも興味をもっている。



（左から）
藤芳 暁、竹内佐年、
ARZHANTSEV, Sergei、
水野 操、田原太平、
藤野竜也

反応動力学研究部門

気相，固相及び表面における化学反応の動力学現象の解明を目的として，シンクロトロン放射や紫外・可視レーザーを用いて以下の研究を行っている。

(後列左から)

吉村大介、野田英之、
東 康史

(前列左から)

清水厚子、野々垣陽一、
宇理須恆雄、王 志宏



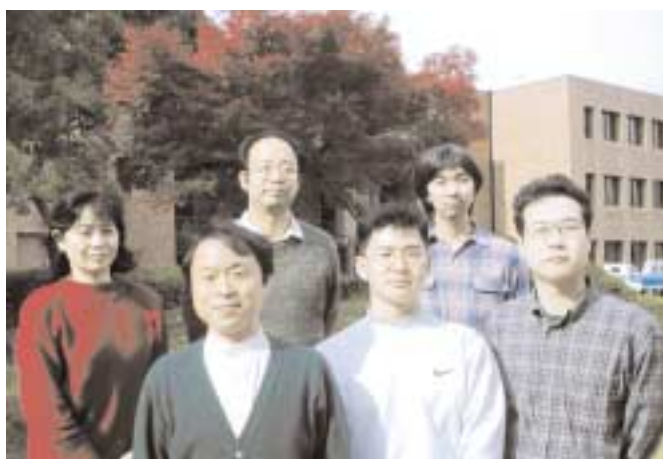
1. STM, IRRAS (赤外反射吸収分光) のその場観察により，半導体表面の内殻電子励起による原子レベルでの構造変化を直接観察する。特に放射光によるナノ加工とナノ構造表面での有機化合物，特に生体関連物質の化学反応およびこれらの単一分子系での観察に重点を置いて研究を進める。

(後列左から)

清水厚子、水谷雅一、
新倉弘倫

(前列左から)

見附孝一郎、岩崎光太、
小野正樹



2. 光子エネルギーが10から200電子ボルトのシンクロトロン放射を用いて，分子や分子集合体の超励起状態の検出とその自動イオン化および単分子的解離反応の機構を解明する。主な実験手法は2次元光電子分光，正・負イオンの質量分析およびイオンや中性フラグメントのレーザー光電子分光とレーザー誘起蛍光分光である。

3. パルスまたは連続発振レーザーとシンクロトロン放射を組み合わせ

たポンプ・プローブおよび2重共鳴分光実験システムを開発する。多電子励起状態や光学禁制状態を生成したり，特定の化学結合に局在した電子遷移を惹起することで，特異な光解離反応ルートの開拓を目指す。

界面分子科学研究部門 (流動研究部門)

1. 放射光励起ナノプロセスを用いたフォトニック結晶の製作

シンクロトロン放射光による表面化学反応を利用して，高い空間分解能で大面積の微細加工ができる「ナノプロセス技術」の開発を行う。そのためには，ナノメートルの寸法を持つ構造における表面吸着分子の化学状態，電子状態，相互作用の観点からの情報が不可欠であり，走査トンネル顕微鏡，近接場光学顕微鏡を利用した観測を行い，分子レベルにおける表面反応過程を明らかにする。

さらに，原子が規則正しく並んだ半導体結晶の中では，電子(エレクトロン)のエネルギーがバンド構造をとることに基づいて種々の機能を持つエレクトロニクスデバイスが実現されている。電子の半導体結晶に相当するフォトニック結晶は，ナノメートル寸法の誘電体を規則的に並べた

構造を持っており、この結晶の中で光子（フォトン）はバンド構造をとる。このようなフォトンのアクティブデバイスであるフォトリソグラフィ結晶を上記のナノプロセス技術を利用して製作する。また、フォトリソグラフィ結晶の評価技術が確立されていない現状から、特に近接場光学顕微鏡を利用した光学特性評価法の確立を目指した研究も実施する。



（後列左から）
竹添法隆、河崎泰宏、
柳田英明、田中貴史、
木原隆義、土井洋一郎
（前列左から）
福井一俊、長岡伸一、
黒澤 宏、佐々木時代、
高嶋圭史

2. 放射光を用いた化合物半導体薄膜の電子構造に関する研究

電子構造は半導体薄膜材料の物性を理解し、制御する為に必要な情報の一つである。本研究はこれら薄膜材料の電子構造に関する知見を実験的に求めることを目的としている。光源として、内殻電子を励起でき、かつ波長可変で直線偏光性にも優れた放射光を用い、内殻吸収とその偏光依存及び光電子分光を測定手段とする。内殻を選択励起出来るので、イオンサイト毎の情報を引き出せるため、特に化合物半導体に威力を発揮する。そこで、これらの手段を用い化合物半導体薄膜材料のバルク・表面・界面の伝導帯及び価電子帯の構造を調べる。

3. 光のナイフの創成 - 内殻準位励起後のサイト選択的解離の研究

一辺が10 cmである正方形の紙の一つの頂点から一辺1 cmの正方形を切り取るには、はさみが使われる。一辺が1 cmである正方形の紙の一つの頂点から一辺1 mmの正方形を切り取るには、ナイフを使うと便利である。それでは、さらに対象が小さくなって、分子から原子もしくは原子団を切り取るうとすればどうすればよいであろうか？ 現在は切り取られる原子や原子団の性質に基づいた化学反応によって、こうした切り取りが行われているが、ナイフに相当する便利な手法は未だ開発されていない。我々は、シンクロトロン放射光を光のナイフとして用い、内殻準位励起後のサイト選択的解離に基づいて、こうした切り取りを行うことを研究する。

分子全体に非局在化している外殻電子と異なり、内殻電子は元々属していた原子付近に局在化している。一つの分子中の同じ原子の同じ内殻の準位でも、その原子の周囲の環境によって内殻電子の励起エネルギーは変化するので、照射光のエネルギーを厳密に選ぶと、分子を構成する原子のうち、特定の原子のみを選択的に励起することが可能である。その結果、その原子との結合だけが選択的に切れるようなサイト選択的解離反応を起こすことができる。我々は、このような、極端紫外光を光のナイフとして用いた新しいタイプの原子分子操作を研究する。

極端紫外光研究部門（外国人客員研究部門）

極端紫外光科学研究系及び他の研究系にまたがって分子・分子集合体の物性並びに反応に関する、幅広い分子科学的研究を行っている。