

研究系

■ 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. 分子の設計と反応の理論と計算

分子科学の限りない夢は、分子を電子レベルで統一的に理解し、「望む構造、物性、機能を自由にデザインして組み立てて思うがままに反応させる」ことである。この実現のための理論と計算およびコンピューターシミュレーションを行っている。組み立てた分子を現実化するには、前駆体や置換基の適切で厳密な選択ばかりでなく、反応経路と反応条件の微妙な設定も要求される。したがって、分子構築から合成実現までを目的



(左から) 崔隆基、李秀栄、高木望、永瀬茂

としている。このために、内外の実験グループと密に連絡し実際の合成の可能性と予測した特性の実証を行っている。また、分子単独の設計ばかりでなく、幾つかの分子ユニットが自己集合的に組織化する系も自由に理論予測できることを目指している。

2. 生体分子の計算機シミュレーション

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や分子動力学法（例えば、マルチカノニカル法やレプリカ交換法）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



(後列左から) 榮慶丈、杉田有治、長島剛宏、依田隆夫
(前列左から) 糸美和子、村田克美、岡本祐幸、小久保裕功

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。

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。

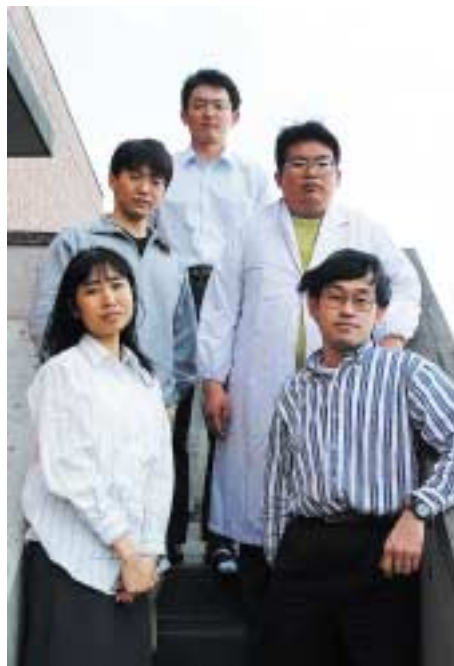


（後列左から）神坂英幸、藤崎弘士、長屋州宣
（前列左から）SKODJE, Rex、中村宏樹、OSHEROV, Vladimir、朱超原

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。

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，磁氣的性質，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，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。



（後列） 加藤 毅
（中列左から）日野 理、深見 宏
（後列左から）鈴木陽子、谷村吉隆

分子基礎理論第三研究部門（客員研究部門）

1. 電子構造研究によるナノネットワーク物質の物理的・化学的性質の解明と物質設計

フラレン・ナノチューブに代表される，共有結合ネットワーク物質群は，その結合トポロジーに依存して非常に多様な性質を示す。そのため，電子構造計算研究が，系の性質を理解し，さらに予言する上で大きな役割を果たしてきた。ここでは，主に密度汎関数法に基づく電子構造計算により，炭素のみな

らずSi, Bなどの共有結合物質を加えたナノメートルスケールの構造を持つ広範なネットワーク物質に対して研究を展開している。特に、それらの分子としての性質と固体相の物性解明、さらには、新物質設計をも視野に入れた研究を目指している。

2. 導電性共役高分子などの低次元電子系やデンドリマーなどのナノ構造物質などを取り上げ、これらの物質が見せる多彩な電氣的、光学的、磁氣的な性質・機能がどのように発現されるかを解明するために、計算物理、化学的な方法を用いて電子状態の理論的な研究を行う。特に、電子間相互作用（電子相関）と電子・格子相互作用の競合、協調が性質にどのように反映されるかに着目して研究を進めるとともに、外的刺激により機能を制御する可能性についても理論的に取り組みたい。

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) 渡辺あゆみ、SETHIA, Ashok
(中列左から) 今井隆志、山崎 健、墨 智成
(前列左から) 山口 毅、木下正弘、平田文男、佐藤啓文

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、 π 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。



(左から) 宮下尚之、米満賢治、岸根順一郎、桑原真人

■ 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

1. 時間的・空間的に高い分解能を持つ新たな測定法の開発と、それによる分子・分子集合体の動的挙動や機能の解明を目指した基礎的研究。最新のレーザー分光技術によって、ピコ秒・フェムト秒オーダーの時間分解能が実現できる。また最近では近接場光学の手法によって、光の回折限界（従来の光学顕微鏡での空間分解能）を超える、ナノメートルオーダーの空間分解能が実現可能である。これらの手法の融合によって、単分子の動的挙動に迫る分子分光法の確立をめざし、超分子等の分子集合体や、液相中の分子ダイナミックスの挙動を調べる。



（左から） 野村恵美子、井村考平、岡本裕巳

2. 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。



森田紀夫

分子構造学第二研究部門（客員研究部門）

1. シトクロム c_3 における電子移動制御について NMR を主要な手段として研究している。このタンパク質は 4 つのヘムを持ち、c 型ヘムとしては異常に低い酸化還元電位を持つ。このタンパク質の酸化還元と構造変化の詳細を明らかにするために、 ^{15}N 標識試料を用いて完全酸化型および

完全還元型の構造決定を進めている。また、われわれは *Shewanella oneidensis* を宿主とするシトクロム c_3 大量発現系を確立することに成功し、アミノ酸置換の研究も進めている。

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。



(後列左から) 佐藤 亮、奥野大地、水谷泰久、HUDECEK, Jiri
(中列) MO, Yu-jun
(前列左から) 長友重紀、LI, Zengqiang、太田雄大、北川禎三、
春田奈美、内田 毅

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レン並びにその複合体のスピン状態、液晶分子の相転移など。



(左から) 古川 貢、大窪清吾、加藤立久、外山南美樹、林 直毅

■ 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。

基礎電子化学研究部門

1. 溶液の中のクラスター

水はその中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るばかりでなく、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

π 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。

4. 金属ナノクラスターの創製と触媒機能

金属原子が数個から数百個集まってできた金属ナノクラスターは、バルクの金属とも金属原子とも異なる性質を持つユニークな物質である。ナノメートルサイズの包接空間を持つ様々な分子を保護剤として利用することによって、サイズの揃った金属クラスターを大量に合成する方法を開発している。また、調整した金属クラスターの構造や触媒機能がサイズに対してどのように振る舞うかを調



(後列左から) 中林孝和、笥美知子、井口佳哉、鈴木優子
(前列左から) 小杉健太郎、西信之、日野和之



(左から) 鈴木優子、根岸雄一、佃達哉

べ、触媒機能の発現機構を解明することを目指している。

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、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
（前列左から）藤井正明、稲垣いつ子、石内俊一



（後列左から）片柳英樹、鈴木俊法、高口博志、松本剛昭
（前列左から）SONG, Jae Kyu、坪内雅明、HOSSAIN, Delwar

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。）
- 3．気相クラスターの分光学的研究（各種レーザー分光を駆使して，気相クラスターの構造と光励起ダイナミックスとの相関を実験的に解明する。）

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

分子から分子へと移動する電子が分子性導体の様々な性質(物性)を担っている。この電子の振る舞いが織りなす様々な電子物性を圧力と温度で制御し，その性質を分子の振動を通して調べるために，反射分光法やマン分光法を用いて研究している。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 π 電子-d電子相互作用の研究，赤外・ラマン分光法による電荷整列の研究，遠赤外偏光反射分光法による電子の遍歴性の研究である。



(後列左から) 鈴木研二、山本 薫、長谷川真史、賣市幹大
(前列左から) 南坊城春奈、中野千賀子、丁 玉琴、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(NMR，ESR)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・スピンダイナミックスの理解。



(左から) 南坊城春奈、中村敏和、藤山茂樹

分子集団動力学研究部門

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、物性研究を行っている。現在の主なテーマは π -d 電子系による分子性磁性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、単一中成分子による分子性金属結晶の開発、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、新有機超伝導体の探索、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。



(後列左から) GRITSENKO, V.、藤原秀紀、田中 寿
(中列左から) 田村格良、GRITSENKO, O.、佐藤春菜、小林速男
(前列) 藤原絵美子

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、分子線エビ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ター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、リソグラフィー技術および無電解鍍金技術を用いて試みる。



(左から) 大石 修、荒 正人、埴田博一、高田正基、GRAAF, Harald

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・超伝導体の開発、物性解明、分子スケールエレクトロニクス基礎、に関する研究を実施している。

■ 関連領域研究系

本研究系では、分子科学と関連諸分野とが関連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いれた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。

関連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)原 功、山原 亮、油 努
(中列左から)加藤 茂、小江誠司、上野隆史、吉岡資郎、大橋雅卓
(前列左から)谷澤三佐子、中井英隆、越山友美、山田雅子、渡辺芳人、
牧原伸征

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。ここ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)熊谷 等、秋田素子、岡 芳美、細越裕子
(前列左から)鈴木健太郎、加藤恵一、今井宏之、井上克也

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）

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



（後列左から）橋之口道宏、福山哲也、清水雄一郎
（前列左から）太田明代、笠井俊夫、久保厚、蔡徳七

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。

3. ゲルの生成過程、脂質二重膜のシミュレーション

当研究室では、化学物理、生物物理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の方法を用いて研究している。

ゲル生成過程に関しては、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る。特徴的な量を定義して、相図を得る。

また、脂質分子のモデルを作成し、二重膜でできた小胞に自己集合する過程や小胞同士の融合のメカニズムを研究している。



（左から）野坂 誠、高須昌子、野口博司

■ 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、ナノ物質創製と評価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、陰地 宏、小杉信博、初井宇記、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、振動ヒ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 of 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） 竹内佐年、藤芳 暁、ARZHANTSEV, Sergei、水野 操、藤野竜也、MANDAL, Debabrata、田原太平

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。

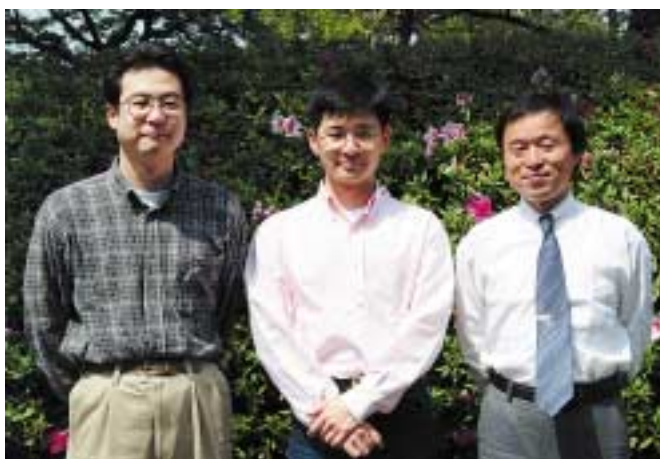
1．STM，IRRAS（赤外反射吸収分光）のその場観察により，半導体表面の内殻電子励起による原子レベルでの構造変化を直接観察する。特に放射光によるナノ物質創製とナノ構造表面での有機化合物，特に生体関連物質の化学反応およびこれらの単一分子系での観察に重点を置いて研究を進める。



（後列左から）滝沢守雄、MORÉ, Sam Dylan、王 志宏、山村周作
（前列左から）藤木 聡、清水厚子、宇理須恆雄、野々垣陽一

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，質量分析および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



（左から） 小野正樹、岩崎光太、見附孝一郎

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. 空間分解分光法による光と固体表面ナノ構造との相互作用の研究

固体光触媒表面で起る光触媒化学反応は、光（主に紫外光）照射によって惹き起される固体光触媒バルクおよび表面での電子励起と、それに引き続く不均一触媒化学反応により構成されている。前者は通常、周期境界条件（バルクでは三次元、表面では二次元）を仮定する、いわば無限の結晶構造を想定したいわゆるバンドモデルで説明され、一方それに引き続く不均一触媒化学反応は、個々の反応分子と、触媒表面に存在するナノメートルオーダーの吸着サイトならびに反応サイトとの相互作用



（後列左から）高林康裕、松本太輝、高嶋圭史、久保園芳博、吉村大介、菅原孝宜
（前列左から）佐々木時代、小宮山政晴、奥平幸司

に強く依存する、すぐれて局所的な現象である。空間的には両極端を想定するこの両プロセスを包含した固体光触媒反応の統合的理解には、光による電子励起過程とその後の物理プロセスの原子レベルでの局所挙動に関する解明が必要不可欠である。

ここではこの目的のために、空間分解能の非常に高い走査型トンネル顕微鏡（STM）に分光測定機能を付加した、いわば空間分解分光法とでも言うべき方法を使用する。この方法により、不均一系固体光触媒の局所構造ならびにそこにおける電子状態をナノおよび原子のレベルで観察し、その光触媒活性と局所構造および局所電子状態との相関を明らかにして、光・触媒表面・反応分子間の相互作用をナノ・原子のレベルで理解しようと試みる。またここで開発・使用される空間分解分光法は、固体光触媒のみならず、太陽電池や微粒子レーザーなどにおける光と固体との相互作用とその表面ナノ構造との関係をみるための研究にも拡張できるものと期待している。

2. シンクロトロン放射光による有機薄膜の表面物性の研究

有機分子は数百万種におよび、さらに官能基の種類を変えることにより新しい機能の導入が可能である。このような有機分子からなる薄膜は高機能をもつ電子デバイスとして期待されているが、表示素子としてはすでに実用化がはじまっている。有機デバイスの特性は、それを構成している有機分子の種類だけでなく、膜表面の構造（分子配向）や電子状態と深く関連している。われわれは、種々の基板（グラファイトなどの層間化合物や金属）上に作成した単分子層のオーダーで制御された有機超薄膜、実用素子により近い複雑な構造をもつ高分子薄膜等に注目する。波長選択性、直線偏光性というすぐれた特性をもつシンクロトロン放射光による角度分解紫外光電子分光を中心とした表面敏感な測定法を用いて、有機薄膜の表面および有機/無機（金属）界面の構造（分子配向の定量的決定）と電子状態を明らかにすることを目的としている。

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。