

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、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