

研究系

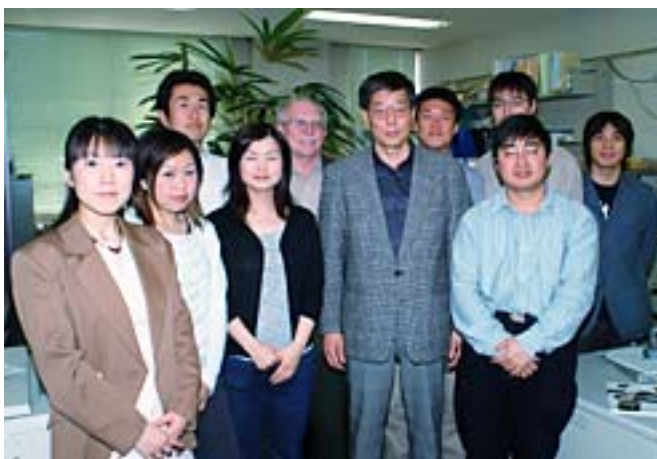
理論分子科学研究系

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、同センターおよび計算分子科学研究系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

分子科学の限らない夢は、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としている。このために、内外の実験グループと密に連携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ナノ分子系も自由に理論予測できることを目指している。



(後列左から) 高木 望、PULAY, P.、李 秀栄、石村和也、河東田道夫
(前列左から) 小林 郁、中島 彩、溝呂木直美、永瀬 茂、崔 隆基

2. 生体分子の計算機シミュレーション

分子シミュレーションの手法により、蛋白質の折り畳み問題に取り組んでいる。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



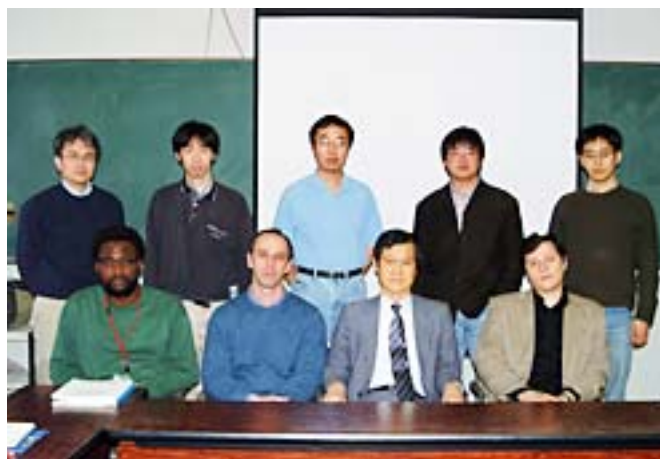
(後列左から) 小久保裕功、中島 彩、伊藤 暁、小野ゆり子
(前列左から) 奥村久士、岡本祐幸、川島雪生

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（所長研究室）

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：①化学反応の起こりやすさを決めている因子の究明，②多自由度系の動力学を扱う理論の開発，③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，④超励起分子の特異な性質と動力学の解明，⑤多体系に現れる統計性と選択性の解明，及び⑥分子過程の新しい制御方法の確立。

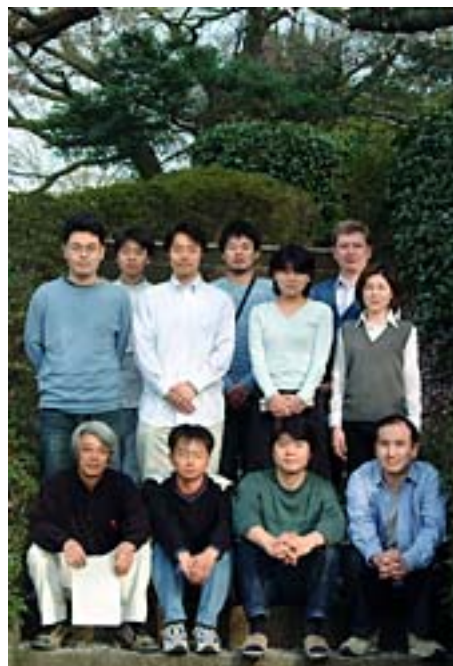


（後列左から）南部伸幸（所内協力研究者）、田村宏之、ZHAO, Yi、ZOU, Shiyang、近角真平
（前列左から）OLOYEDE, Oluwaponmile、MIL'NIKOV, Genady V.、中村宏樹、KONDORSKIY, Alexey D.

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こと及び多次元トンネルの有効な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。特に現在は、特別推進研究「Zhu-Nakamura理論に基づく非断熱化学動力学の統合的研究」に取り組んでいる。

分子基礎理論第三研究部門

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い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）丸山 豊、松上 優、KOBRYN, Oleksandr
（中列左から）石塚良介、生田靖弘、谷村あゆみ、桑 美和子
（前列左から）平田文男、宮田竜彦、鄭誠虎、吉田紀生

2. 分子にはいろんな機能があるが、集まることによって初めて現われる性質があり、それらは制御できる。例えば、組成変化、加圧、光照射などで環境をわずかに変え、結晶構造や色が変わったり、磁性をもったり、超伝導になったりすることがある。こうした変化に向かう局所的な“たね”が競合しながら成長・増殖して、もの全体の性質を変えてしまうこともある。微視的にみると集団としての電子の量子力学的な性質が変わっている。これらの物性の発現機構やダイナミクスを理論的に研究する。



(後列左から) 前島展也、大塚雄一、井上 仁
(前列左から) 石川浩美、米満賢治

分子基礎理論第四研究部門（客員研究部門）

1. 凝縮相系における分子振動と分子間相互作用の理論

凝縮相系における分子間相互作用と、その分子振動に対する影響を解析し、系の構造・ダイナミクスと振動数領域・時間領域分光シグナルの関係を明らかにする。特に、①液体や生体分子系における振動励起の共鳴移動と振動緩和およびそれらの競合、②生体分子内色素分子の振動および光学的性質と分子間相互作用、③分子の電子構造的特徴と分子間相互作用の関係、などについて重点的に解析する。また、これらの解析に必要な、分子振動の諸性質を理論的に解析するためのソフトウェアの開発も行う。