



## 「水素結合ネットワーク構造の探究」

（平成 16～18 年度 特別推進研究「質量選択・レーザー多重共鳴振動分光法の開拓による水和ネットワーク構造研究」）

所属（当時）・氏名：東北大学・名誉教授・三上 直彦  
（現所属：東北大学大学院理学研究科・客員教授）

### 1. 研究期間中の研究成果

#### ・背景（事象の初歩的な説明）

『水素結合』は、水の惑星＝地球における生命・非生命現象に普遍的に現れる分子間相互作用であり、その特性が自然界で巧妙に利用されている重要な分子間力である。一方、代表的水素結合性物質の『水』について、1分子の構造あるいは凝集系（氷や水）の物性は、ともに詳細に判明しているが、水分子が2個、数個、・・・多数個集合体（水クラスター）の分子間結合構造は未知であった。水クラスターは生命関連物質の諸機能発現に重要な役割を果たすとされており、それらの分子レベル構造やマイクロ水和過程を解明することは、分子科学分野の重要な発展動向の一つである。

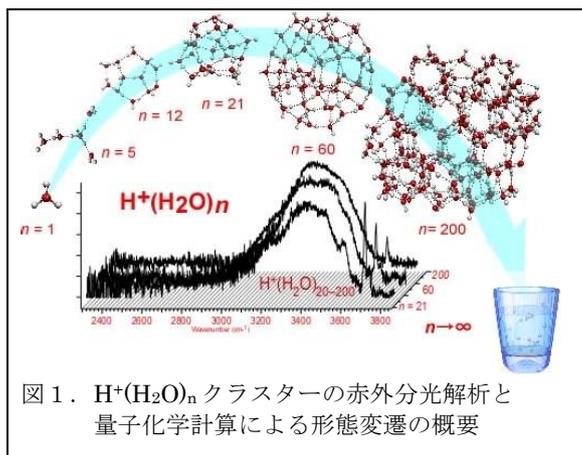


図1.  $H^+(H_2O)_n$  クラスターの赤外分光解析と量子化学計算による形態変遷の概要

#### ・研究内容及び成果の概要

上記の背景を踏まえて、分子レベルでの水素結合研究開拓を目標とする以下の課題を推進した。

- ① 質量選択・レーザー多重共鳴振動分光法の開拓：質量数 2000amu 迄のサイズ選別赤外分光計測法を開拓し、量子化学計算解析を併用して最高水準の物質構造解析法として確立した。
- ② 水和・水素結合ネットワーク構造研究：「水分子」から「水分子の集合体（クラスター）」に成長する過程での水素結合ネットワーク構造を初めて解析し、水和・溶媒和構造を分子レベルで解明した。
- ③ 新奇・特異水素結合研究：生命科学分野の分子レベル研究に直結する微弱水素結合、イオン種の水素結合、2水素結合、など未踏研究領域を開拓し、分子間力の特性や結合構造に関する基礎情報を提供した。

### 2. 研究期間終了後の効果・効用

#### ・研究期間終了後の取組及び現状

- ① 水素結合ネットワーク構造研究の継続：大サイズのプロトン付加水クラスター種を分光解析し、200量体内部では結晶相「氷」に類似したネットワーク構造が発現することなどを解明した。（図1）
- ② 化学反応中間体構造の分光研究の新展開：分子クラスターを反応前駆体とする化学反応中間体構造解析研究を開拓し、芳香族化合物の求核置換反応中間体（ $\sigma$  錯体）の特異な結合構造を初めて実証した。（図2）
- ③ 微弱分子間結合の精密分光：ベンゼン・メタンなど基本的物質間の微弱結合体を精密分光計測して、高精度理論計算解析と併せて微弱  $\pi$  型水素結合の特性を明らかにした。
- ④ 精密計算解析の共同研究：基本的化合物間の分子間力に関する高精度の実験情報を提供し、精密量子化学計算解析を行った。

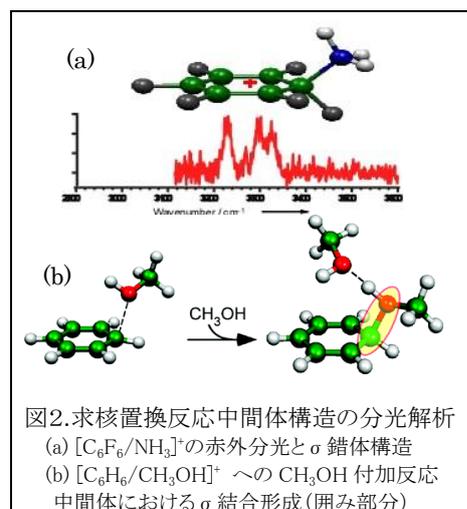


図2. 求核置換反応中間体構造の分光解析  
(a)  $[C_6F_6/NH_3]^+$  の赤外分光と  $\sigma$  錯体構造  
(b)  $[C_6H_6/CH_3OH]^+$  への  $CH_3OH$  付加反応中間体における  $\sigma$  結合形成（囲み部分）

#### ・波及効果

- ① 開発した赤外分光計測法は、分子クラスター構造に関する先端分光研究の国際的標準手法となっている。
- ② 微弱分子間力、反応中間体構造の分光情報提供により、生命科学、有機化学分野に新たな視点を供した。
- ③ 先端的研究課題の実践を通じて、物理化学分野・分子科学領域に携わる若手研究者を多く育成した。