

二国間交流事業 共同研究報告書

令和4年4月5日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[代表者所属機関・部局]
東北大学・大学院理学研究科
[職・氏名]
助教・菅野 学
[課題番号]
JPJSBP1 20192201

1. 事業名 相手国: ベルギー (振興会対応機関: F.R.S.-FNRS) との共同研究

2. 研究課題名

(和文) 分子の光誘起超高速ダイナミクス

(英文) Ultrafast photoinduced molecular dynamics

3. 共同研究全実施期間 平成31年4月1日 ~ 令和4年3月31日 (3年0ヶ月)

4. 相手国代表者(所属機関・職・氏名【全て英文】)

University of Liège・Professor・REMACLE Françoise

5. 委託費総額(返還額を除く)

本事業により執行した委託費総額	4,464,526 円
内訳	
1年度目執行経費	2,175,026 円
2年度目執行経費	2,289,500 円
3年度目執行経費	- 円

6. 共同研究全実施期間を通じた参加者数(代表者を含む)

日本側参加者等	4名
相手国側参加者等	2名

* 参加者リスト(様式 B1(1))に表示される合計数を転記してください(途中で不参加となった方も含め、全ての期間で参加した通算の参加者数となります)。

7. 派遣・受入実績

	派遣		受入
	相手国	第三国	
1年度目	3	-	1(-)
2年度目	-	-	-(-)
3年度目	-	-	-(-)
4年度目	-	-	-(-)

* 派遣・受入実績(様式 B1(3))に表示される合計数を転記してください。

派遣: 本委託費を使用した日本側参加者等の相手国及び相手国以外への渡航実績(延べ人数)。

受入: 相手国側参加者等の来日実績(延べ人数)。カッコ内は本委託費で滞在費等を負担した内数。

8. 研究交流実績の概要・成果等

(1)研究交流実績概要(全期間を通じた研究交流の目的・研究交流計画の実施状況等)

本課題は、分子の電子動力学計算を世界的に先導する相手国側代表者 **Remacle** の研究グループと連携し、非断熱遷移（原子核の動きに起因する電子状態間の乗り移り）に伴う核波動関数（核波束）の分岐や干渉などの量子効果を記述でき、大きな分子の光化学反応に適用可能な理論的手法を開拓することを目指して行われた。1年目は、8月に来日した **Mignolet** 博士を約1ヶ月間受け入れ、11月に菅野・河野・鈴木の3名がベルギーに約2週間滞在し、議論を交わした。2年目以降は、新型コロナウイルス感染症の世界的拡大により相互の訪問は断念せざるを得なかったが、オンライン形式で研究交流を継続した。

(2)学術的価値(本研究交流により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

DNA を構成する核酸塩基のプロトタイプとみなせるピラジンの時間分解真空紫外光電子スペクトルを計算し、対応する実験結果と比較することで、ピラジンの超高速無輻射失活の初期段階は2状態描像（第2電子励起状態から第1電子励起状態への直接遷移）で記述できることを明らかにした。また、同様のアプローチによって得られた真空紫外光電子スペクトルの計算結果を実験グループに提供することで、電子環状反応の代表例である1,3-シクロヘキサジエンの光開環反応の過程で生成する2電子励起状態の観測に世界で初めて成功した。さらに、我々が開発してきた、核波束の伝搬方向を自動予測してガウス基底を生成・更新するガウス基底自動展開法を発展させた。分子構造に対応したデカルト座標ガウス基底を対象の化学反応において重要な平衡構造や遷移状態、それらを結ぶ反応経路（およびそれらの周辺）に重点的に配置することで、使用するガウス基底の数を抑えて波束を効率的に展開する手法（構造ベースガウス基底展開法）へと昇華させた。

(3)相手国との交流(両国の研究者が協力して学術交流することによって得られた成果)

上述のピラジンおよび1,3-シクロヘキサジエンの光電子スペクトル計算は、**Mignolet** 博士の東北大学滞在中に協力して実施したものである。また、構造ベースガウス基底展開法のアイデアは、菅野・河野・鈴木がベルギーにて **Remacle** と交わした議論が基礎となって構築された。本課題の成果は、両グループの学術交流無しでは成し遂げられなかったものである。

(4)社会的貢献(社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか)

ナノマシンの研究分野に対する社会の期待は大きく、実用化に向けて高い量子収率を有する人工分子モーターの開発が望まれている。本課題では、高速回転可能な分子モーターの設計指針の確立に向けて、実験的測定のみでは解明が難しい分子モーターの光異性化反応経路の詳細を非断熱分子動力学シミュレーションによって探索できることを示した。

(5)若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取り組み、成果)

本課題には2名の大学院生(鈴木と前田)が参加した。鈴木は、上述のベルギー滞在を通して初めての海外渡航を経験した。**Remacle** との交流が推進力となって構造ベースガウス基底展開法の開発に成功し、それが2022年3月の博士号取得につながった。鈴木は同年4月から博士研究員となり、構造ベースガウス基底展開法のさらなる改良に従事している。前田は、大規模系に有効な非断熱分子動力学法の展開と応用に関して優れた研究成果を挙げ、2021年3月に修士号を取得した。

(6)将来発展可能性(本研究交流事業を実施したことにより、今後どのような発展の可能性が認められるか)

ナノマシンとして実用的な機能を発現する分子モーターの開発が世界中で盛んに進められているが、未だ途上段階である。今後、計算精度と計算負荷のバランスを図るなどの工夫を凝らし、分子モーターの光異性化シミュレーションの信頼性を向上させて、一方向回転に起因する機能発現の予測につなげたい。

(7)その他(上記(2)~(6)以外に得られた成果があれば記述してください)

例: 大学間協定の締結、他事業への展開、受賞、産業財産権の出願・取得など

前田が2019年5月に開催された第22回理論化学討論会において優秀ポスター賞を受賞した。