

二国間交流事業 共同研究報告書

令和6年4月17日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[日本側代表者所属機関・部局]

静岡大学・理学部

[職・氏名]

准教授・松本剛昭

[課題番号]

JPJSBP 120229917

1. 事業名 相手国: ドイツ (振興会対応機関: OP) との共同研究

2. 研究課題名

(和文) 赤外分光による芳香族二量体およびクラスターの電荷共鳴状態の研究

(英文) Study on charge resonance interactions in aromatic dimers and clusters probed by infrared spectroscopy

3. 共同研究実施期間 令和4年4月1日 ~ 令和6年3月31日 (2年0ヶ月)

【延長前】 令和 年 月 日 ~ 令和 年 月 日 (年 ヶ月)

4. 相手国側代表者(所属機関名・職名・氏名【全て英文】)

Technische Universität Berlin, Professor, Otto Dopfer

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		3,900,000 円
内訳	1年度目執行経費	1900000 円
	2年度目執行経費	2000000 円
	3年度目執行経費	- 円

6. 共同研究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	11 名
相手国側参加者等	6 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	2	0	0()
2年度目	4	0	0()
3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: 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)。カッコ内は委託費で滞在費等を負担した内数。

8. 研究交流の概要・成果等

(1)研究交流概要(全期間を通じた研究交流の目的・実施状況)

・目的: 芳香族分子の二量体およびクラスターの電荷共鳴カチオンを研究対象とし、分子間で共有される電荷分布偏向を分光学的に決定することを目的とする。特に、溶媒和形成による構造非対称化と電荷分布偏向との相関を解明することに重点を置く。さらに大学院生に国際交流を経験させるため、学生を交えた共同研究および国際シンポジウムへの参加を促進する。

・実施状況: 2022 年度に 2 回、2023 年度に 4 回、ベルリン工科大学へ共同研究打ち合わせ、論文執筆、シンポジウム参加のために渡航した。その過程で、芳香族電荷共鳴および芳香族カチオンの微視的溶媒和に関する論文が 3 通受理された。また 1 通は審査中、1 通は近日中に投稿予定である。ベルリンで開催されたシンポジウム(JSPS Core-to-Core プログラム関連)にて口頭とポスターの発表を 1 件ずつ行った。

(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)

芳香族二量体やクラスターの電荷共鳴錯体は、P 型半導体に代表される分子デバイスや G-rich DNA 鎖における長距離電荷輸送のモデルに位置づけられる。特に共有電荷の分布偏向についての情報は電荷移動プロセスの機構を解く鍵となりうる。本研究交流では、電荷分布偏向の高精度な決定を分光実験で行うことに成功した。ピロール二量体カチオンの NH 振動を観測し、従来の電子遷移観測よりも一桁だけ精度よく電荷分布を見積もることに成功した。理論に頼ることなく実験的に最適解が得られることに学術的な価値がある。

(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)

電荷共鳴錯体の研究は予期せぬ形で始まった。松本が行っていた中性水素結合クラスターの構造解明を、カチオンに展開して拡張することを Dopfer 教授に提案してベルリンで共同実験を開始した。その過程で、二量体カチオンの電荷共鳴形成および赤外分光による電荷分布偏向の決定可能性に気がつき、現在に至っている。これまでに得られた研究成果は、本学術交流の賜物である。

(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)

電荷共鳴相互作用は、半導体に代表される電子デバイスの基礎となる原理である。本研究の対象である微視的な電荷共鳴錯体は、デバイスの構造微細化や精密制御を促進する上で必要な電荷分布情報に関する基礎的情報を与える。間接的ではあるが、デバイス技術開発に本研究が寄与することで社会貢献に寄与する。

(5)若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取組、成果)

国際シンポジウムへの参加により、地方国立大学に留まるだけでは決して経験できない世界レベルの研究を肌感覚で知ることができたはずである。参加した大学院生は博士課程へは進学しないが、修士修了後に社会に出た際には、世界基準で問題解決ができる人材として羽ばたける素地を身につけたと期待している。

(6)将来発展可能性(本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)

現在継続している研究では、電荷共鳴に直接関与する芳香族分子集団の配向変化が、微視的溶媒和のサイズに応じて制御できる可能性を見出しつつある。これを応用すれば分子レベルのスitchング技術を開発できる。また、微視的溶媒和のサイズをパラメータとした、電荷共鳴多量体クラスターカチオンにおける電荷ホッピングへの応用展開などができれば大変興味深い。

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

例: 大学間協定の締結、他事業への展開、受賞など

2024 年度から開始される JSPS 研究拠点形成事業「分子認識における溶媒和効果の解明」に参加研究者として採用され、引き続きベルリン工科大学の Dopfer 教授との共同研究を継続する。将来的には大学間協定の締結も視野に入れた交流を継続したいと考えている。