

先端研究拠点事業

平成24年度 実施計画書

—国際戦略型—

採用年度	平成 24 年度	採用番号	22003	領域	化学
分科	基礎化学	細目	物理化学	分科細目 コード	4601

1. 日本側拠点機関名 東京工業大学

日本側コーディネーター（所属部局・職・氏名） 資源化学研究所・教授・藤井正明

研究交流課題名 (和文) イオン化誘起分子スイッチング

(英文) Photoionisation-induced switch in aromatic molecule-solvent recognition

研究交流課題に係るホームページ <http://www.res.titech.ac.jp/~kiso/CoreToCore/index.html>

2. 採用期間 平成 24年 4月 1日 ~ 平成 27年 3月 31日(36 ヶ月)

3. 先端研究拠点事業としての全期間を通じた交流目標（*申請書に記入した交流目標を転載すること）

DNAなどの生体分子や近年注目を集めている自己組織化による超分子材料などは水素結合やファンデルワールス力などの分子間力により形成される柔らかな分子系である。これらの分子系はDNAの複製過程などに見られる様に、条件に応じて分子間の配向を自在に変化させていることが特徴であり、分子間相互作用の理解および分子間力の制御が生体分子や超分子材料の本質と深く関わっている。このような弱い分子間相互作用を研究するには、溶媒分子などの外圧の影響を全く受けない系を用いるのが望ましい。その中でも、超音速ジェット法により実現される気相分子クラスターは、分子間相互作用に総称される水素結合やファンデルワールス力によって形成されており、分子間相互作用を分子レベルで研究するには理想的である。本事業では、「イオン化誘起分子スイッチング」をキーワードに、芳香族酸/溶媒分子認識系をモデル分子として、光イオン化により、分子クラスター内で溶媒分子にどのような配向変化がもたらされるか、結合サイトを変えるのかを明らかにし、分子間相互作用の理解と分子間力の制御の基礎を確立する。

4. 前年度までの交流活動による目標達成状況（*拠点形成型については平成23年度採用課題のみ記入。

国際戦略型平成24年度採用課題は拠点形成型における目標達成状況を記入のこと）

拠点形成型では、分子間相互作用を理解するためのモデル系として、フェノール/希ガス（アルゴン、クリプトン）およびメタンクラスターを用いて研究を開始した。フェノール/希ガスクラスターでは、（1：1）クラスターにおいても「イオン化誘起分子スイッチング」がピコ秒の時間領域で起こること、また、フェノール/希ガス（1：1）クラスターでは「イオン化誘起分子スイッチング」の反応収率は低いが、フェノール/メタン（1：1）クラスターでは100%の収率であることが日独英の緊密な連携により明らかとなった。この収率の違いは「分子スイッチング」後のエネルギー緩和過程の差で説明された。さらに、アセトアニリド/水（1：1）クラスターにおいては、水分子がC=O結合からNH結合へと水素結合サイトを変えるイオン化誘起サイトスイッチングの証明、およびその動的過程の実時間観測に初めて成功した。これは、全ての水溶媒中における光誘起反応で恒常的に生じている励起分子周辺における水和構造変化のダイナミクスを分子論に立脚して理解する端緒となる極めて重要な結果であり、国際戦略型への移行に相応しい成果である。

5. 本年度の交流計画の概要

(共同研究)

共同研究は国際戦略型より仏国が加わり、計4カ国での実験グループを形成する。即ち、EIグループ(独)、ZEKEグループ(英)、ESIグループ(仏)、TRグループ(日)と区分けして、「分子スイッチング」をキーワードに、分子間相互作用の理解から化学反応の機構解明・制御を目指す。平成24年度は、1) 拠点形成型の重要な成果である水分子のイオン化誘起サイトスイッチングをターゲットに、溶質分子周辺における水和構造変化のダイナミクスを分子論に立脚して理解する事を目指す(日独英)、2) 水分子の動的過程と強く関連するプロトン付加による相互作用変化に起因するプロトン・水素原子移動の反応機構解明(日仏独)、に取りかかる。いずれの研究も迅速に開始することが肝要と思われるため、年度開始後直ちに、4-5月: ZEKEグループ、5月: ESIグループへ日本から人員を派遣し共同研究を開始する計画である。また、この結果をふまえ、8-9月: TRグループ、10月: EIグループ、11月: ZEKEグループ、12月: ESIグループ、12-1月: TRグループのローテーションで研究者/学生が相互に渡航して共同実験を推進する。

なお、年度開始後直ちに英国/仏国へ派遣される研究者には、派遣期間中に、現地で相手国コーディネーターや研究者らと実験/今後の方針について十分な議論をしてもらう。その結果報告をかねて、平成24年度のなるべく早い時期(5-6月を予定)に日本の参加研究者のみを集めて共同研究の打ち合わせを行い、情報を共有するとともに、今後の研究推進に役立てる。

(セミナー)

申請時には国内外の参加者を一堂に会したキックオフミーティングを開催する予定であったが、上述の通り、共同研究開始を迅速に行う方が研究推進にとってメリットが大きいと判断した。よって、平成24年度は年度末に近い1月上旬に、若手シンポジウムの形式で仏国にて成果報告会を兼ねてセミナーを開催する。本プロジェクト参加者が一堂に会する会議であり、日本からは本プロジェクトに参加する若手研究者、大学院生が多数渡航し、共同研究の成果発表を行う。近年、若手研究者/大学院生が国際学会において英語で口頭発表をする機会是非常に少なくなっているため、このシンポジウムで多くの若手研究者に講演機会を与え、国際経験を積ませる計画である。また、若手研究者数名には、シンポジウムの実行委員会にも参加してもらい、シンポジウムのオーガナイズも併せてお願いする。

(研究者交流)

共同研究推進による研究成果を世界中に広く情報発信するには著名な国際学会での発表が最も効果的であり、本先端研究と関連する国際学会へ若手研究者を中心に多数派遣予定である。若手研究者にとっては、英語での講演を行うチャンスでもあり、国際的に活躍する若手研究者育成には必須である。以下に若手研究者派遣予定の主だった国際会議を示す。(東アジア化学反応会議: 4月/台湾、オハイオミーティング-分子分光会議: 6月/アメリカ、量子化学会議: 6月/アメリカ及び8月フィンランド、光化学会議: 7月/ポルトガル、GRC-原子・分子会議: 7月/アメリカ、GRC-電子分光会議: 7月/アメリカ、GRC-イオン会議: 2月/アメリカ)

また、学術成果の発信という観点からは、共同研究成果の国際学術雑誌への論文投稿が最も重要である。そこで、各国で行う共同実験の際には実験結果に関する議論の場を設け若手研究者を中心として活発な議論を行うとともに、各連携機関間で密に情報交換を行い共同研究成果としてまとめることで、質の高い学術雑誌への投稿を目指す。社会的にインパクトの大きい論文が掲載された場合は、同時に新聞等のマスメディアでも発表し広く情報発信を行う。各研究成果や学会等での発表実績、ワークショップの結果等はインターネットのホームページより随時報告し研究成果の発信に努める。

6. 実施組織

○日本側実施組織

拠点機関	東京工業大学
実施組織代表者 職・氏名	学長・伊賀健一
コーディネーター 所属部局・職・氏名	資源化学研究所・教授・藤井正明
協力機関数	3 機関
協力機関名	横浜市立大学／首都大学東京／九州大学
拠点機関事務組織： 事務総括責任者	国際部国際事業課・課長・塚田 由佳
事務総括担当者	国際部国際事業課・スタッフ・布施 沙織
経理管理責任者	研究推進部研究資金管理課・課長・佐藤 千裕
経理管理担当者	研究推進部研究資金管理課・グループ長・椿 富美子

○相手国側実施組織 1

国名	ドイツ
拠点機関	ベルリン工科大学
コーディネーター 所属部局・職・氏名	物理化学研究所・教授・Otto DOPFER
協力機関数	1 機関
協力機関名	デュッセルドルフ大学

○相手国側実施組織 2

国名	英国
拠点機関	マンチェスター大学
コーディネーター 所属部局・職・氏名	光子科学研究所・教授・Klaus MÜLLER-DETHLEFS
協力機関数	2 機関
協力機関名	ヨーク大学、オックスフォード大学

○相手国側実施組織 3

国名	フランス
拠点機関	パリ大学南校
コーディネーター 所属部局・職・氏名	パリ大学南校・教授・Christophe JOUVET
協力機関数	
協力機関名	

※交流相手国が複数の場合、適宜、枠を追加して記入すること。