

(様式 1)

先端研究拠点事業
平成 25 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

(* 国際戦略型平成 25 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)

昨年度は、新たに発見したアセトアニリド/水クラスターの水分子サイトスイッチングのより詳細なメカニズム解明を進めるために、独国の理論家との共同研究を開始した。この共同研究は正にこの拠点形成によりもたらされた研究交流である。さらに、実験との整合性、理論計算の精度の向上のために実験条件を変化させたダイナミクス測定を遂行中である。また、当初からの課題であるフェノール/希ガス(アルゴン)については、マンチェスター大学との共同実験により MATI-IR 分光法という新たな試みを開始した。さらに、(1:2) クラスターについては、昨年の交流セミナーで提案された実験条件の制御法を導入することで新規異性体の存在を確認した。これは交流セミナーの成果である。その他にも、より広範な系におけるサイトスイッチング反応の探索を行ない、トリプタミンなど複数の系においてサイトスイッチング反応を新たに見出した。これらの系に対する実時間ダイナミクス計測は今年度からの課題であるが、様々な反応例の発見はサイトスイッチング反応の一般性拡大の観点から重要な結果である。これらの交流の成果は、国際学術雑誌や著名な国際学会で多数発表された。

5. 本年度の交流計画の概要

(共同研究)

共同研究は、ドイツ、英国、フランス、日本の4カ国を拠点とする実験グループを形成する。即ち、EI グループ (ドイツ)、ZEKE グループ (英国)、ESI グループ (フランス)、TR グループ (日本) 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 25 年度は、共同研究における共通研究課題として以下の2つをとりあげる。

1) 水分子のイオン化誘起サイトスイッチング

2) プロトン・水素原子移動の反応機構解明

1) については、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し、2) については特に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の解明を目標とする。いずれの研究も目標達成には、各研究グループの緊密な連携が不可欠であり、年度開始後直ちに国際交流を開始する。具体的には、5月：ESI グループ、6月：EI グループ、7月：ZEKE グループへ日本から人員を派遣し共同研究を推進する計画である。また、この結果をふまえ、8-9月：TR グループ、10月：ESI グループ、11月：EI グループ、12月：ZEKE グループ、1-2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。また、これらの共同研究による実験結果は、プロジェクト参加者全員に迅速にフィードバックすることが研究を強力に推進するには不可欠なので、日本の参加研究者のみを集めての共同研究の打ち合せも国内で頻繁に行い、情報の共有をするとともに研究推進に役立てる。

(セミナー)

平成 25 年度は12月上旬に、公開シンポジウム形式で英国・マンチェスター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は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。なお、公開シンポジウム形式としては1日のみ開催を予定しているが、公開シンポジウムの前後1-2日を非公開形式の成果報告会およびH26年度の研究方針／交流計画決定のための円卓会議を行う計画である。

(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。また、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、H25年度における若手研究者派遣予定の主だった国際会議を示す。(オハイオミーティング-分子分光会議：6月／米国、GRC-生体分子会議：7月／米国、アジア化学会議：8月／シンガポール、量子化学会議：8月／ハンガリーなど) また、国内でも時間分解分光会議 (別府)、先端振動分光会議 (神戸) の2つの著名な国際会議が開催されるので多くの研究者を派遣する。

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。

(様式 1)

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・三島良直
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	4 機関
協力機関名	横浜市立大学／首都大学東京／九州大学／広島大学
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・園和茂仁
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・佐藤千裕

○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	1 機関
協力機関名	エクスマルセイユ大学

※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。