

採用年度	平成22年度
種別	拠点形成型

先端研究拠点事業
平成22年度 事業実績報告書

平成23年4月14日

領域・分野	化学・基礎化学
分科細目名（分科細目コード）	物理化学（4601）
採用番号	22003
研究交流課題名（和文）	イオン化誘起分子スイッチング
研究交流課題名（英文）	Photoionisation-induced switch in aromatic molecule-solvent recognition
採用期間	平成22年4月1日～平成24年3月31日（24ヶ月）

《実施組織体制》

日本側

拠点機関名	東京工業大学
実施組織代表者（所属・職・氏名）	学長・伊賀健一
コーディネーター（所属・職・氏名）	資源化学研究所・教授・藤井正明
協力機関数	2機関
参加者数	18名

相手国1

国名	ドイツ
拠点機関名	ベルリン工科大学
コーディネーター（所属・職・氏名）	物理化学研究所・教授・Otto Dopfer
協力機関数	1機関
参加者数	6名

相手国2

国名	イギリス
拠点機関名	マンチェスター大学
コーディネーター（所属・職・氏名）	光子科学研究所・教授・Klaus Müller-Dethlefs
協力機関数	0機関
参加者数	4名

交流目標の達成（見込）状況

① 平成22年度事業計画における達成目標

分散力サイト（芳香環）と水素結合サイト（OH、NH 基）を同時に有する分子は DNA や神経伝達物質を始めとする生体関連分子に多くみられ、しかも、あらゆる生理現象内に見られる分子認識機構と深く関わっている。このような分子認識機構を本質的に理解する手がかりとして、水素結合力と分散力を同時に考慮し、分子の種類、環境、電子状態などで配位子や溶媒がどちらのサイトに配位するのか、どのような変化で結合サイトを変えるのか（分子スイッチング）を明らかにすることは非常に重要である。平成22年度は、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／希ガスクラスタールおよびフェノール／メタンクラスタールを用い、研究を開始した。本事業では、日独英3カ国の実験グループを、TRグループ（日本）、EIグループ（独国）、ZEKEグループ（英国）と区分けして、独自の研究グループで長年培われてきた様々な分光法を駆使して、分子間相互作用の理解から分子認識系の制御の基礎の確立、さらには、誘起ダイナミックスの制御を目指した。

② 平成22年度事業計画の達成状況

（1）共同研究については、年度当初の交流計画とは少しだけ時期と期間がシフトしたものの、9月：TRグループ、7、10月：ZEKEグループ、11月：EIグループ、12-1月：TRグループのローテーションで派遣・受入を滞りなく進行できた。研究成果についても、フェノール／希ガスクラスタールおよびフェノール／メタンクラスタールにおいて「イオン化誘起分子スイッチング」の構造解析、ダイナミックス解析が進み共著論文5報（Core to core program のクレジット有：2報）を発表するに至った。

（2）セミナー（シンポジウム）は、予定では2回であったところを3回開催した。これは、研究が当初の計画以上に進んだことと、さらには、各国のプロジェクト参加者を一同に集めて、成果報告を含めた検討・討論会を数多く開催した方が研究を強力に推進することが可能であると考えたからである。セミナーは、日独英でそれぞれ1度ずつ開催し、日本開催だけでなく独国あるいは英国開催のセミナーにも実際に実験に携わる大学院生を含めた若手研究者を数多く派遣し、研究結果に対する討論及び今後の研究方針の決定を行う機会とした。（このセミナーに多くの若手研究者を派遣することができたことも研究が強力に推進することができた一因と考えている。）

（3）研究者交流において最も重要な役割は情報発信と考えた。世界中に広く高効率で情報発信するには相手国以外の国で開催される著名な国際学会での発表が効果的であるが、相手国2カ国はいずれもEU圏なので発表の場はアメリカを第1に考えた。中でも、最大規模の Pacificchem2010（12月／ハワイ）や51回の伝統を持つ量子化学国際会議（2月／St. Simons Island）で成果発表を行ったことにより、海外の著名な研究者に対して十分に情報発信をすることができたのではないかと考えている。

本事業においては、（1）から（3）において延べ30名334日間もの長きに渡り海外に派遣することができ、その中心を担ったのは、アカデミックポジションを目指す若手の研究者（大学院生を含む）であった。これは、世界に通用する人財育成の面から考えると、目に見えない成果ではあるが多大な貢献ができたのではないかと考えている。本事業に参画した若手研究者の将来に期待したい。

実施状況

日本側グループでは、拠点機関に東京工業大学、協力機関に首都大学東京、横浜市立大学を配置し、赤外—紫外多重共鳴分光法を中心に、光イオン化による「イオン化誘起分子スイッチング」のダイナミクス解析を行う。独国では、拠点機関にベルリン工科大学、協力機関にデュッセルドルフ大学を配置し、電子衝撃イオン化赤外分光法によるイオン状態の最安定構造の観測を行う。英国の拠点機関はマンチェスター大学であり、超高分解能光電子分光法であるZEKE法、MATI法を駆使して、クラスターカチオン構造解析を行う。各国おけるに研究参加者リストは別表2に添付する。

日本側拠点機関における研究交流課題への取り組み（事務支援体制等の観点より）

- 1) 東京工業大学（日本側拠点機関）とベルリン工科大学（独側拠点機関）の間で2008年10月に全学での学術交流協定を締結。
 - 2) 東京工業大学資源化学研究所（日本側拠点機関）とマンチェスター大学光子科学研究所（英側拠点機関）の間で2011年2月に部局間での学術交流協定を締結。
- 以上2つの学術交流協定により、本プロジェクトの研究交流課題支援のみでなく、定常的な3国間の研究者交流・学生交流・学術情報交換のサポートが可能となっている。

共同研究)

平成22年度は、3カ国での実験グループをEIグループ（独国）、ZEKEグループ（英国）、TRグループ（日本）と区分けして、分子間相互作用の理解から分子認識系の制御の基礎の確立、さらには、誘起ダイナミクスの制御を目指した。研究日程は、9月：TRグループ、7,10月：ZEKEグループ、11月：EIグループ、12—1月：TRグループのローテーションで共同研究を進めた。もちろん、EIグループ、ZEKEグループの実験は数名の研究者が日本から渡航して相手国で共同実験を行い、TRグループ（日本）の実験にはドイツ、イギリスから数名の研究者が来日し、共同研究を行った。年度当初の交流計画とは少しだけ時期と期間がシフトしたものの、計画以上に研究を推進できたと考えている。具体的には、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/希ガスクラスターおよびフェノール/メタンクラスターを用いて研究を行った。フェノール/アルゴンクラスターおよびクリプトンクラスターでは、(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」が起こること、また、反応の速さはピコ秒オーダーであることがEIグループ（ドイツ）とTRグループ（日本）が中心となった共同研究で明らかとなった。さらに、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明らかとなった（ZEKEグループ（イギリス）とTRグループ（日本）の共同研究）。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。実験結果の解析には、各国の協力機関の研究者（理論化学が専門）と連携し、理論的解析も併用した。

セミナー

平成22年度はセミナーを予定では2回であったところを3回開催した。これは、研究が当初の計画以上に進んだことと、さらには、各国のプロジェクト参加者を一同に集めて、成果報告を含めた検討・討論会を数多く開催した方が研究を強力に推進することが可能であると考えたからである。まず、9月10日に日本で「イオン化誘起分子スイッチング」キックオフミーティングを開催した。これは、本事業に参加する研究者全員がプロジェクトの概要・研究目標を共有することが主目的であった。本セミナーに先立って、7月・9月の国際会議で本プロジェクトの情報発信を既に行っていた（研究者交流欄を参照）ためフランスより4名の研究者に興味を持って参加いただけた。特に、C. Juvet 教授は、「イオン化誘起分子スイッチング」と関わりの深いプロトン・水素原子移動に関する研究の第一人者であり、今後の研究方針にも関わる貴重なコメントを頂いた。23年度はC. Juvet 教授との研究討論会の機会をもうけ、共同研究の可能性を模索する。2回目は11月19日に独国・ベルリンで、3回目は3月11日に英国・マンチェスターでシンポジウムを開催した。日本からは若手研究者・大学院生が多数参加し、共同研究の成果発表を行い、研究結果に対する討論及び今後の研究方針の決定を行う機会とした。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いので、2度のシンポジウムにおいて延べ6名の大学院生・若手研究者に講演機会を与え、国際経験を積ませた。若手研究者数名には、シンポジウムの実行委員になってもらい、プログラム作成等を含めたシンポジウムのオーガナイズも担当してもらった。本セミナーは国際的に通用する若手研究者養成の点においての貢献度は極めて高いといえる。

研究者交流

共同研究に先立ち、日本側コーディネーターと数名の若手研究者が実験計画の協議のためドイツを訪問した。若手研究者にとっては、この先2年間共同実験に利用する装置の使用方法を習得することも目的の1つであった。渡航時期は6月で、同時期開催された国際会議（Isolated Biomolecules and Biomolecular Interactions : Berlin, 12-17 June 2010）にも参加し、海外へ向けて本事業の情報発信を大々的に行った。9月には日本国内での国際会議（Molecular & Ionic Cluster）にも多数参加し、海外の著名研究者に対して情報発信を行った。2度に渡る国際会議での情報発信の効果は大きく、上述の通り、プロトン・水素移動反応研究の第一人者であるC. Juvet 教授のセミナー参加をもたらした。続けて、共同研究推進による研究成果を上述のセミナー以外の国際会議で発表を行った。世界中に広く情報発信するには相手国以外の国で開催される著名な国際学会での発表が効果的と考えられる。22年度はアメリカで主催される国際会議（Pacifichem2010 : 12月／ハワイ、量子化学国際会議 : 2月／St. Simons Island）での発表を選択し、若手研究者を派遣し研究成果発表・情報発信を行った。また、国内の学会でも大学院生を中心に積極的に成果発表を併せて行った。本事業においては、特に、アカデミックポジションを目指す若手の研究者（大学院生を含む）に対して多くの支援を行うことが出来たので、世界に通用する人材の育成の面で大いに貢献できたのではないかと考えている。