

先端研究拠点事業 平成23年度 事業実績報告書

平成24年 4月 1日

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
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	20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	7名

相手国2

国名	英国
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	2 機関
参加者数	4 名

交流目標の達成（見込）状況

目標の達成（見込）状況を、A～Eのそれぞれの観点から、ポイントを絞って記載すること。

A 学術的な成果 B 持続的な協力関係の基盤構築 C 若手研究者育成における成果

D 国際的学術情報の収集整備 E 事業の波及効果

① 平成23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23年度は、平成22年度に引き続き、3カ国での実験グループをEIグループ（ドイツ）、ZEKEグループ（英国）、TRグループ（日本）と区分けして、「イオン化誘起分子スイッチング」をキーワードに、研究対象をフェノール／希ガスクラスター（およびメタンクラスター）から芳香族酸／溶媒分子認識系まで拡張し、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と誘起ダイナミックスの制御を目指した。

② 平成23年度事業計画の達成状況

※成果の公表状況を、別表1にて作成のこと。

※派遣・受入等の交流実施については、別表4-1、4-2にて作成のこと。

(1) 共同研究については、震災の影響を少なからず受けたため当初計画通りには進まなかったものの、10-11月：EIグループ、11-12月：TRグループ、12月：ZEKEグループのローテーションで派遣・受入を短期集中的に行い、十分な成果を上げたと考えている。特に、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ッ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る。

(2) セミナーは、予定では2回であったところを3回開催した。これは、若手の研究者／大学院生にもっと英語での発表機会を与えた方が教育的である、との判断である。セミナーは、11月にドイツおよび日本で1度ずつ開催したのち、23年度の成果報告会をかねて、3月に再びドイツで開催した。3月のドイツでのセミナーには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（戦略型移行後）の研究方針の決定を行う機会とすることができた。

(3) 研究者交流においては拠点形成型の最終年度であった事もあり、著名な国際会議に活発に参加し成果報告／情報発信を行った。本事業の研究内容に対する関心、評価も高く、いくつかの成果は国際会議において、招待講演（GRC-MIC／米国：藤井）やホットトピックス（IBBI／スイス：酒井）として講演する機会も与えられた。

平成23年度は、(1)から(3)において延べ29名243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、助教／大学院生であった。これは、世界に通用する人材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

研究交流計画実施にあたる実施体制

国内外の拠点機関及び協力機関の間の、協力連携の状況

※研究参加者リストを、別表2にて作成のこと。

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った。ドイツでは、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った。英国の拠点機関はマンチェスター大学であり、協力機関として、ヨーク大学、オックスフォード大学が参加し、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った。

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) 東京工業大学資源化学研究所（日本側拠点機関）とヨーク大学化学科（英側協力機関）の間で部局間学術交流協定を締結。

これにより、3カ国の拠点機関間の交流だけでなく、拠点-協力機関間の定常的な研究者交流・学生交流・学術情報交換のサポートが可能となりつつある。

共同研究

年度当初の交流計画をふまえ、共同研究を実施するにあたっての枠組み、活動内容、得られた成果等 (国内外の拠点機関・協力機関との連携状況も、考慮すること)

平成23年度は、平成22年度に引き続き、3カ国での実験グループをEIグループ（ドイツ）、ZEKEグループ（英国）、TRグループ（日本）と区分けして、「イオン化誘起分子スイッチング」をキーワードに、研究対象をフェノール/希ガスクラスター（およびメタンクラスター）から芳香族酸/溶媒分子認識系まで拡張し、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と誘起ダイナミクスの制御を目指した。研究日程は、10-11月：EIグループ、11-12月：TRグループ、12月：ZEKEグループのローテーションで派遣・受入を短期集中的に行った。震災の影響を受けたため交流時期と期間については当初計画通りには進まなかったものの、十分な研究成果を得られたと考えている。特に、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世界で初めて成功した。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る。フェノール/希ガスおよびメタンクラスターに関しては、ZEKEグループが測定したREMPI、MATIスペクトルに対して、ドイツの協力機関であるデュッセルドルフ大学の研究グループが高分解能分光を用いた精密解析を開始し、他国間の拠点-協力機関間の連携もさらに密になって研究推進している。また、全ての実験結果の解析には、日本の協力機関（首都大学東京、横浜市立大学）が理論的解析をサポートしている。

セミナー

- ・研究交流計画におけるセミナーの位置づけを、他の交流形態と関連させつつ述べること
 - ・交流目標達成に向け、セミナーが果たした貢献を、具体的に述べること
- ※具体的な実施状況及び成果については、別表3にて作成のこと

平成23年度はセミナーを当初計画では2回であったところを3回開催した。これは、若手の研究者／大学院生にもっと英語での発表機会を与えた方が教育的である、と判断したためである。セミナーは、まず11月3日にドイツで「Symposium on Aromatic Recognition Phenomena」と題してミニシンポジウムを開催した。これは、本年度は研究対象をフェノール／希ガスクラスター（およびメタンクラスター）から芳香族酸／溶媒分子認識系まで拡張するにあたり、芳香族酸／溶媒分子認識系に関する研究の現状や研究方針を共有／議論することが主目的であった。引き続き、11月17日には日本で、「Integration of experiment and theory in aromatic molecule-solvent recognition」と題してミニシンポジウムを開催した。これは、実験結果の解析に不可欠な理論的解析をさらに強力に推進するために、実験研究者と理論研究者の意見交換会が必要と考えて開催した。3回目は3月1日にドイツ・ベルリンで「Seminar of Core-to-Core Program on Aromatic Cluster Spectroscopy」と題してシンポジウムを開催した。日本からは若手研究者を中心に多数参加し、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（戦略型移行後）の研究方針の決定を行う機会とすることができた。本年度は大学院生に対して英語での発表を積極的に企画した結果、3度のシンポジウムにおいて延べ6名の大学院生に講演機会を与えることができた。少なからず国際経験を積ませることができたのではないかと考えている。

研究者交流

- ・研究交流計画における研究者交流の位置づけを、他の交流形態と関連させつつ述べること
 - ・交流目標達成に向け、研究者交流が果たした貢献を、具体的に述べること
- ※具体的な交流状況については、別表4-1、4-2にて作成のこと

研究者交流においては拠点形成型の最終年度であった事もあり、共同研究推進による研究成果を著名な国際会議に活発に参加し成果報告／情報発信を行った。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。

23年度は米国やヨーロッパで主催される国際会議（GRC-MIC：2月／米国、IBBI：1月／スイス、量子化学国際会議：7月／スペインなど）での発表を選択し、主に若手研究者を派遣し研究成果発表・情報発信を行った。本事業の研究内容に対する関心、評価も高く、いくつかの成果は国際会議において、招待講演（GRC-MIC：藤井）やホットトピックス IBBI：酒井）として講演する機会も与えられた。また、国内の学会においては、本事業のテーマに最も密接な学会である、分子科学討論会（9月／札幌）において、若手研究者／大学院生を中心に積極的に成果発表を併せて行った。

本事業では、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）に対して国内外を問わず多くの支援を行うことが出来たので、世界に通用する人財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。