

研究種目：特定領域研究
研究期間：2007～2011
課題番号：19056001
研究課題名（和文） 大サイズクラスターの赤外分光によるアミノ酸の大規模水和構造の研究

研究課題名（英文） Extensive hydration structure of amino acids probed by infrared spectroscopy of large-sized clusters

研究代表者

藤井 朱鳥 (FUJII ASUKA)
東北大学・大学院理学研究科・准教授
研究者番号：50218963

研究分野：化学

科研費の分科・細目：基礎化学・物理化学

キーワード：水素結合・クラスター・水・赤外分光・アミノ酸

1. 研究計画の概要

大きなサイズの中性またはプロトン付加水クラスターにアミノ酸1分子を埋め込む。その赤外分光により、多数の水分子によって形成されるアミノ酸の水和構造について解明を進める。

2. 研究の進捗状況

研究計画の前半に当たり、大サイズクラスターの赤外分光に関して、方法論を確立した。また、アミノ酸を含む大サイズ水クラスターの構造を考える上で参照データとなる、中性及びプロトン付加水クラスターの赤外分光を行った。

中性クラスターに関しては、従来の赤外-紫外二重共鳴分光法のスキームを再検討し、電子遷移波長ではなく、質量分析法をサイズ選別の手段として採用することにより、 $\Delta n < 10$ 程度のサイズ選択性を保って大サイズクラスターの赤外分光を行うことが可能であることを実証した。また、この方法を用いて、 $n=50$ 程度までのサイズの中性水クラスターの赤外分光を行い、水の水素結合ネットワーク中の部分構造がサイズにより変化していく様子を捉えることに成功した。

プロトン付加水クラスターに関しても、重連型四重極質量分析器と新型赤外 OPO 光源の整備、導入を行い、水 200 量体というこれまでに例の無い大サイズまでサイズ選別赤外分光を行える体制を整えた。

3. 現在までの達成度

①当初の計画以上に進展している。

（理由）当初計画では、全5年の研究期間の内、まず前半3年を大サイズクラスターの赤外分光のための開発に費やし、後半2年で実際にアミノ酸分子を含むクラスターの分光研究を進めることを予定していた。前半3年が完了した現時点で、大サイズのクラスターの赤外分光について方法論を確立させることが出来た。当初はサイズ選択に電場を用いることが出来るプロトン付加水クラスターのみを対象として考えていたが、計画途中で中性クラスターに関しても大サイズに対応したサイズ選択赤外分光スキームの開発に成功した。更に、アミノ酸を水和したクラスターのスペクトルと直接比較可能な水クラスターのスペクトルが、中性、プロトン付加のそれぞれにおいて、この3年間で計測することが出来た。アミノ酸を含む大サイズクラスターのスペクトルが観測されれば、スペクトルの相違点から直ちにアミノ酸の溶媒和に伴う水側水素結合の構造変化について知見を得られる体制が整った。

3. 今後の研究の推進方策

当初予定に則り、今後2年間でアミノ酸を含む大サイズの中性およびプロトン付加水クラスターの赤外分光を推進し、水クラスターのスペクトルとの比較から、アミノ酸の大規模水和構造について新たな知見を得る。

5. 代表的な研究成果

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

[雑誌論文] (計 21 件)

(1) Kenta Mizuse, Toru Hamashima, Asuka Fujii, Infrared spectroscopy of phenol-(H₂O)_{n>10}: Structural strains in hydrogen bond networks of neutral water clusters. J. Phys. Chem. A 査読有 113, 12134-12141 (2009).

(2) Dan Ding, Jer-Lai Kuo, Ken-ichiro Suhara, Asuka Fujii, Naohiko Mikami, Proton switch correlated with the morphological development of the hydrogen-bond network in H⁺(MeOH)_m(H₂O)₁ (m=1-9): A theoretical and infrared spectroscopic study. J. Phys. Chem. A 査読有 113, 2323-2332 (2009).

(3) Jer-Lai Kuo, Zhi-zhong Xie, Dan Bing, Asuka Fujii, Toru Hamashima, Ken-ichiro Suhara, Naohiko Mikami, Comprehensive analysis of the hydrogen bond network morphology and OH stretching vibrations in protonated methanol-water mixed clusters, H⁺(MeOH)₁(H₂O)_n (n=1-8). J. Phys. Chem. A 査読有 112, 10125-10133 (2008).

(4) Jer-Lai Kuo, Asuka Fujii, Naohiko Mikami, Theoretical analyses of the morphological development of the hydrogen bond network in protonated methanol clusters. J. Phys. Chem. A 査読有 111, 9438-9445 (2007).

(5) Kenta Misuse, Asuka Fujii, Naohiko Mikami, Long range influence of an excess proton on the architecture of the hydrogen bond network in large-sized water clusters. J. Chem. Phys. 査読有 126, 231101-1-4 (2007).

(6) Ken-ichiro Suhara, Asuka Fujii, Kenta Mizuse, Naohiko Mikami, Jer-Lai Kuo, Compatibility between methanol and water in the three-dimensional cage formation of large-sized protonated methanol-water mixed clusters. J. Chem. Phys. 査読有 126, 194306-1-8 (2007).

[学会発表] (計 70 件)

(1) Asuka Fujii, Infrared spectroscopy of size-selected large water clusters, Discussion meeting on spectroscopy and dynamics of molecules and clusters, Goa, India, Feb. 18-21, 2010.

(2) 水瀬賢太、三上直彦、藤井朱鳥 プロトン付加水クラスターH⁺(H₂O)_nにおける大規模水素結合ネットワーク構造 第2回分子科学討論会 福岡国際会議場 2008年9月24-27日

(3) 濱島 徹, 水瀬 賢太, 藤井 朱鳥 大サイズ Phenol-(H₂O)_n (n<~50)の赤外分光 ~大サ

イズ水クラスターの水素結合ネットワーク構造~ 第3回分子科学討論会, 名古屋大学 東山キャンパス、平成21年9月21-24日

(4) Asuka Fujii, Hydrogen bond structure of large-sized protonated water clusters Gordon Research Conference "Molecular and Ionic Clusters, Centre Paul Langevin, Aussois, France, Sept. 7-12, 2008

(5) Asuka Fujii, Infrared Spectroscopy of Large-Sized Protonated Clusters: Morphological Development of Hydrogen Bond Network, Okazaki Conference "Molecular Science and Chemical Biology of Biomolecular Function", Okazaki, Institute for Molecular Sciences, Nov. 9-11, 2007

(6) 水瀬賢太、藤井朱鳥、三上直彦 巨大サイズプロトン付加水クラスター、H⁺(H₂O)₁₅₋₁₀₀、の赤外分光~水の大規模水素結合ネットワークに対する余剰プロトンの影響~ 第1回分子科学討論会、仙台、東北大学、2007年9月17-20日

[その他]

ホームページ

<http://www.mikamilab.chem.tohoku.ac.jp/>