

科学研究費補助金研究成果報告書

平成 24 年 5 月 23 日現在

機関番号：11301
 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

研究成果の概要（和文）：アミノ酸の水和構造を考える上で基礎となる水の水素結合ネットワークに関連して、水クラスターのサイズ（構成分子数）増大に伴う構造発展を赤外分光で調べた。アミノ酸 1 分子を水和するに足るサイズの水クラスターが形成する水素結合ネットワーク構造を解明した。

研究成果の概要（英文）：Hydrogen bond network structures of neat water is fundamental information to understand hydrated structures of amino acids. We have studied hydrogen bond network structures of water clusters, which have enough sizes (number of molecules) to hydrate the whole body of an amino acid molecule, by size-selective infrared spectroscopy.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007 年度	8,000,000	0	8,000,000
2008 年度	8,000,000	0	8,000,000
2009 年度	8,000,000	0	8,000,000
2010 年度	8,000,000	0	8,000,000
2011 年度	8,000,000	0	8,000,000
総計	40,000,000	0	40,000,000

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

1. 研究開始当初の背景

アミノ酸の水和構造は生体内におけるタンパク質構造との関連性から強い関心が寄せられており、その気相モデル系である水とクラスターの構造研究が多く報告されている。しかしながら、これまでの水分子の数が一桁台の気相クラスター研究では、アミノ酸の親水基周りの局所的な水和構造に解明が留まっている。

2. 研究の目的

水分子数が数十から数百に及ぶ大サイズ

クラスターを用いれば、アミノ酸一分子全体を水和することが可能となり、局所水和構造を超えた情報が得られるものと期待できる。そこで、まず水クラスターのサイズ（構成分子数）数十～数百領域における水素結合構造発展過程を赤外分光法により調べ、続いてクラスターにアミノ酸分子を含んだ場合の赤外スペクトルとの差分を取ることで、水和による水側の水素結合構造の変化を捉えることが可能になると着想した。本研究では、まずこれまでになく大サイズの水クラスタ

ーにサイズ選択赤外分光を適用し、大きなサイズ領域における水素結合構造発展を明らかにする。

3. 研究の方法

中性水クラスター(H_2O_n)のサイズ選択赤外分光は、発色団としてクラスターにフェノール1分子を混入させ、紫外-赤外二重共鳴法の適用により行った。大サイズクラスターでは電子遷移がブロードになるため、共鳴イオン化後の生成イオンを飛行時間型質量分析器でサイズ分離し、対応する中性サイズの分布モニターに用いた。イオン化に伴いフラグメンテーションが予想されるが、その分($\Delta n \sim 6$)をサイズの不確実性とした。また、プロトン付加水クラスター $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ はサイズ増大に伴い余剰プロトンの影響が希釈されて水クラスターと同一の水素結合構造へと収斂する事が予想されるため、重連型質量分析器を用いた赤外解離分光を適用し、厳密にサイズ選択したクラスターの赤外スペクトルを得た。

4. 研究成果

(1) 水クラスターにおける内部形成の観測

小サイズクラスターでは全ての分子が表面に位置するが、サイズ増大に伴い、クラスターには内部が形成されることが予想される。内部にある水分子は可能な水素結合サイトが全て結合されて4配位サイトとなるが、気相クラスターでは4配位サイトの存在を確定した報告はこれまで無かった。

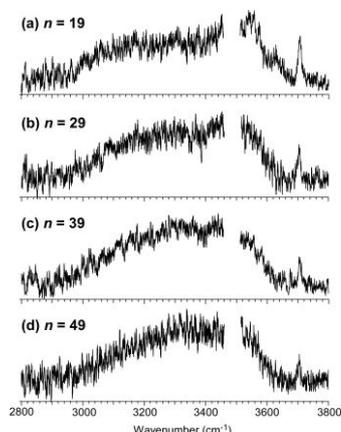


図1 (H_2O_n)のサイズ選別赤外スペクトル

図1に示すようにサイズ選別した水クラスター(H_2O_n)($n \sim 20 \sim 50$)のOH伸縮振動領域赤外スペクトルはサイズ増大と共に明瞭な変化を示す。高波数領域に現れるシャープなピークはクラスター表面の自由OH伸縮振動であり、低波数側のブロードなバンドとして現れる水素結合OH伸縮振動との相対強度がサイズと共に減少する。これはクラスターにおける表面/内部の分子数比変化を示しており、観測されたサイズ領域でクラ

スターの内部形成が進んでいることが明らかとなった。サイズ増大に伴い 3300cm^{-1} 付近に明瞭なバンドの盛り上がり観測され、密度汎関数法によるモデルクラスターの計算との比較から、4配位サイトの水素結合OH伸縮振動に帰属されることが分かった。

(2) プロトン付加水クラスターにおける内部の結晶化

より大きなサイズにおける水の水素結合構造変化を観測するため、プロトン付加水クラスター $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ のサイズ選択赤外スペクトルを $n=20-200$ の領域において観測した。

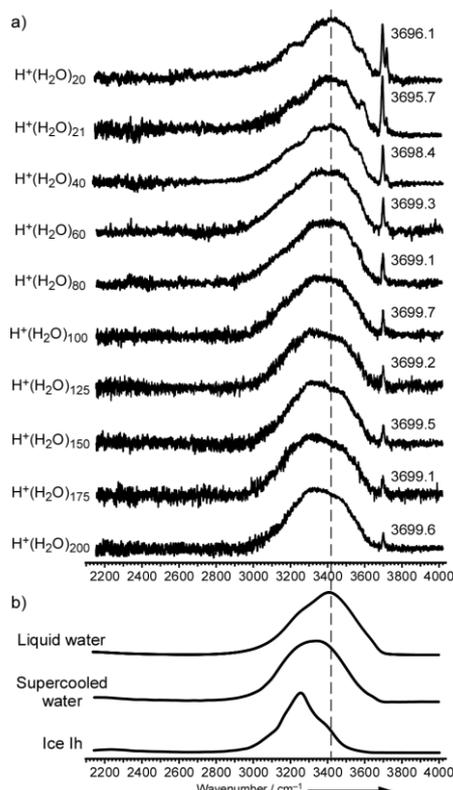


図2 a) $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ のサイズ選別赤外スペクトル b) 凝集相(液体、過冷却水、氷)における水の吸収スペクトル

図2aに示すようにプロトン付加水クラスターの水素結合OH伸縮振動バンドは $n=100$ 付近から徐々に低波数シフトを示す。液体の水から過冷却水を経て氷への状態変化に伴う水素結合OH伸縮振動バンドの変化も図2bに示すように類似した低波数シフトであり、 $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_{200}$ のスペクトルは部分的に結晶形成が起きていると予想される過冷却水のスペクトルに非常に近い。このことから $n=100$ 付近からクラスター内部で4配位サイト同士によるネットワーク形成が進み、結晶化が始まることが示唆された。これは過去の分子動力学計算による予測とも一致している。

5. 主な発表論文等

(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 34 件)

- (1) Kenta Mizuse, Yuta Suzuki, Naohiko Mikami, Asuka Fujii, Solvation-induced σ -complex structure formation in the gas phase: A revisit to the infrared spectroscopy of $[\text{C}_6\text{H}_6\text{-(CH}_3\text{OH)}_2]^+$. J. Phys. Chem. A 査読有 115, 11156-11161 (2011).
- (2) Kenta Mizuse, Asuka Fujii, Structural origin of the antimagic number in protonated water clusters $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$: Spectroscopic observation of the “missing” water molecule in the outermost hydration shell. J. Phys. Chem. Lett. 査読有 2, 2130-2134 (2011).
- (3) Asuka Fujii, Hiromasa Hayashi, Jae Woo Park, Takaki Kazama, Naohiko Mikami, Seiji Tsuzuki, Experimental and theoretical determination of the accurate CH/π interaction energies in the benzene-alkane clusters: Correlation between interaction energy and polarizability. Phys. Chem. Chem. Phys. 査読有 13, 14131-14141 (2011).
- (4) Kenta Mizuse, Jer-Lai Kuo, Asuka Fujii, Structural trends of ionized water networks: Infrared spectroscopy of water cluster radical cations $(\text{H}_2\text{O})_n^+$ ($n=3-11$). Chem. Sci. 査読有 2, 868-876 (2011).
- (5) Kenta Mizuse, Asuka Fujii, Infrared photodissociation spectroscopy of $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_6/\text{M}_m$ ($\text{M}=\text{Ne, Ar, Kr, Xe, H}_2, \text{N}_2, \text{and CH}_4$): messenger-dependent balance between H_3O^+ and H_2O_5^+ core isomers. Phys. Chem. Chem. Phys. 査読有 13, 7098-7104 (2011).
- (6) Toru Hamashima, Kenta Mizuse, Asuka Fujii, Spectral signatures of 4-coordinated sites in water clusters: Infrared spectroscopy of phenol- $(\text{H}_2\text{O})_n$ ($\sim 20 < n < \sim 50$). J. Phys. Chem. A 査読有 115, 620-625 (2011).
- (7) Kenta Mizuse, Naohiko Mikami, Asuka Fujii, Infrared spectra and hydrogen-bonded network structures of large protonated water clusters $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=20-200$). Angew. Chem. Int. Ed. 査読有 49, 10119-10122 (2010).
- (8) Satoshi Maeda, Yoshiyuki Matsuda, Shinichi Mizutani, Asuka Fujii, Koichi Ohno, Long-range migration of a water molecule to catalyze a tautomerization in photoionization of the hydrated formamide cluster. J. Phys. Chem. A 査読有 114, 11896-11899 (2010).
- (9) Kenta Mizuse, Hayato Hasegawa, Naohiko Mikami, Asuka Fujii, Infrared and electronic spectroscopy of benzene-ammonia cluster radical cations $[\text{C}_6\text{H}_6\text{-(NH}_3)_{1,2}]^+$: Observation of isolated and microsolvated s-complexes. J. Phys. Chem. A 査読有 114, 11060-11069 (2010).
- (10) Dan Bing, Toru Hamashima, Asuka Fujii, Jer-Lai Kuo, Anticooperative effect induced by mixed solvation in $\text{H}^+(\text{CH}_3\text{OH})_m(\text{H}_2\text{O})_n$ ($m+n=5$ and 6): A theoretical and infrared spectroscopic study. J. Phys. Chem. A 査読有 114, 8170-8177 (2010).
- (11) Yoshiyuki Matsuda, Ayako Yamada, Ken-ichi Hanaue, Naohiko Mikami, Asuka Fujii, Catalytic action of a single water molecule in a proton-migration reaction. Angew. Chem. Int. Ed. 査読有 49, 4898-4901 (2010).
- (12) Dan Bing, Toru Hamashima, Quoc Chinh Nguyen, Asuka Fujii, Jer-Lai Kuo, Comprehensive analysis on the structure and proton switch in $\text{H}^+(\text{CH}_3\text{OH})_m(\text{H}_2\text{O})_n$ ($m+n=5$ and 6). J. Phys. Chem. A 査読有 114, 3096-3102 (2010).
- (13) Keisuke Ohta, Yoshiyuki Matsuda, Naohiko Mikami, Asuka Fujii, Intermolecular proton-transfer in acetic acid clusters induced by vacuum-ultraviolet photoionization. J. Chem. Phys. 査読有 131, 18304 (2009).
- (14) Kenta Mizuse, Toru Hamashima, Asuka Fujii, Infrared spectroscopy of phenol- $(\text{H}_2\text{O})_{n>10}$: Structural strains in hydrogen bond networks if neutral water clusters. J. Phys. Chem. A 査読有 113, 12134-12141 (2009).
- (15) Toshihiko Maeyama, Keiji Yoshida, Izumi Yagi, Asuka Fujii, Naohiko Mikami, Interpreting the physical background of empirical solvent polarity via photodetachment spectroscopy of microsolvated aromatic ketyl anions. J. Phys. Chem. A 査読有 113, 10593-10602 (2009).
- (16) 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 $\text{H}^+(\text{MeOH})_m(\text{H}_2\text{O})_1$ ($m=1-9$): A theoretical and infrared spectroscopic study. J. Phys. Chem. A 査読有 113, 2323-2332 (2009).
- (17) Yoshiyuki Matsuda, Naohiko Mikami, Asuka Fujii, Vibrational spectroscopy of size-selected neutral and cationic clusters combined with vacuum-ultraviolet one-photon ionization detection. Phys. Chem. Chem. Phys. 査読有 11, 1279-1290 (2009).
- (18) Yoshiyuki Matsuda, Keisuke Ohta, Naohiko Mikami, Asuka Fujii, Infrared spectroscopy for acetone and its dimer based on photoionization detection with tunable coherent vacuum-ultraviolet light. Chem. Phys. Lett. 査読有 471, 50-52 (2009).
- (19) 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, $\text{H}^+(\text{MeOH})_1(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=1-8$). J. Phys. Chem. A 査読有 112, 10125-10133 (2008).
- (20) Masaki Hachiya, Yoshiyuki Matsuda, Ken-ichiro Suhara, Naohiko Mikami, Asuka Fujii, Infrared predissociation spectroscopy of

cluster cations of protic molecules, $(\text{NH}_3)_n^+$, $n=2-4$ and $(\text{CH}_3\text{OH})_n^+$, $n=2,3$. J. Chem. Phys. 査読有 129, 094306 (2008).

(21) Hayato Hasegawa, Kenta Mizuse, Masaki Hachiya, Yoshiyuki Matsuda, Naohiko Mikami, Asuka Fujii, Observation of an isolated intermediate of the nucleophilic aromatic substitution reaction by infrared spectroscopy. Angew. Chem. Int. Ed. 査読有 47, 6008-6010 (2008).

(22) Daichi Sakai, Yoshiyuki Matsuda, Masaki Hachiya, Mayumi Mori, Asuka Fujii, Naohiko Mikami, Size-selected infrared predissociation spectroscopy of neutral and cationic formamide-water clusters: Stepwise growth of hydrated structures and intracluster hydrogen transfer induced by vacuum ultraviolet photoionization. J. Phys. Chem. A 査読有 112, 6840-6849 (2008).

(23) Toshihiko Maeyama, Izumi Yagi, Asuka Fujii, Naohiko Mikami, Photoelectron spectroscopy of microsolvated benzophenone radical anions to reveal the origin of solvatochromic shifts in alcoholic media. Chem. Phys. Lett. 査読有 457, 18-22 (2008).

(24) Seiji Tsuzuki, Asuka Fujii, Nature and physical origin of CH/π interaction: significant difference from conventional hydrogen bonds. Phys. Chem. Chem. Phys. 査読有 10, 2584-2594 (2008).

(25) Seiji Tsuzuki, Kazumasa Honda, Asuka Fujii, Tadafumi Uchimar, Masuhiro Mikami, CH/π interactions in methane clusters with polycyclic aromatic hydrocarbons. Phys. Chem. Chem. Phys. 査読有 10, 2860-2865 (2008).

(26) Asuka Fujii, Kenta Shibasaki, Takaki Kazama, Ryouusuke Itaya, Naohiko Mikami, Seiji Tsuzuki, Experimental and theoretical determination of the accurate interaction energies in benzene-hahomethane; the unique nature of the activated CH/π interaction of haloalkanes. Phys. Chem. Chem. Phys. 査読有 10, 2836-2843 (2008).

(27) 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).

(28) V. Lapere, B. Lucas, M. Barat, J. A. Fayeton, Y. J. Picard, C. Jouvét, P. Carcabal, I. Nielsen, C. Dedonder-Lardeux, G. Gregoire, A. Fujii, Comprehensive characterization of the photodissociation pathways of protonated tryptophan. J. Chem. Phys. 査読有 127, 13413-1-11 (2007).

(29) V. Lapere, B. Lucas, M. Barat, J. A. Fayeton, Y. J. Picard, C. Jouvét, P. Carcabal, I. Nielsen, C.

Dedonder-Lardeux, G. Gregoire, A. Fujii, Characterization of neutral fragments issued from the photodissociation of protonated tryptophan. Phys. Chem. Chem. Phys. 査読有 9, 5330-5334 (2007).

(30) Izumi Yagi, Toshihiko Maeyama, Asuka Fujii, Naohiko Mikami, Stepwise solvatochromism of ketyl anions in the gas phase: Photodetachment excitation spectroscopy of benzophenone and acetophenone radical anions microsolvated with methanol. J. Phys. Chem. A 査読有 111, 7646-7652 (2007).

(31) 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).

(32) Yoshiyuki Matsuda, Masaki Hachiya, Asuka Fujii, Naohiko Mikami, Stimulated Raman spectroscopy combined with vacuum ultraviolet photoionization: Application to jet-cooled methanol clusters as a new vibrational spectroscopic method for size-selected species in the gas phase. Chem. Phys. Lett. 査読有 442, 217-219 (2007).

(33) 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).

(34) Kenta Shibasaki, Asuka Fujii, Naohiko Mikami, Seiji Tsuzuki, Magnitude and nature of interactions in benzene-X (X=ethylene, acetylene) in the gas phase: Significantly different CH/π interaction of acetylene as compared with those of ethylene and methane. J. Phys. Chem. A 査読有 111, 753-758 (2007).

[学会発表] (計 120 件)

(1) 藤井朱鳥 クラスタ分光で探る水の構造 日本化学会春期年会 第2次先端ウォッチング「高次分子システムのための分子科学: 実験と理論の挑戦」 慶應義塾大学 横浜 2012年3月26日

(2) 藤井朱鳥 分子クラスター ~質量分析と組み合わせた赤外分光研究~ イオン反応研究会 大阪府立大学 堺 2011年12月3日

(3) 藤井朱鳥 大サイズクラスターの分光研究: 現状と展望 分子研研究会、岡崎コンファレンスセンター、岡崎 2011年11月1日

(4) 濱島 徹, 水瀬賢太, 鈴木雄太, 藤井朱鳥, KUO Jer-Lai 希ガス付着による水素結合構造のスイッチング ~ $\text{H}^+(\text{CH}_3\text{OH})_n\text{-Ar}$, Neの赤外分光~ 分子科学討論会、札幌コンベンションセンター、札幌 2011年9月20-23日

- (5) 水瀬賢太、藤井朱鳥 メッセンジャー法によって冷却されたプロトン付加水クラスターの赤外分光分子科学討論会、札幌コンベンションセンター、札幌 2011年9月20-23日
- (6) 前山俊彦、八木 泉、吉田啓二、藤井朱鳥、三上直彦 フルオレノンアニオンのプロトン性溶媒中における異常発光：気相クラスターの光電子脱離分光とDFT計算による解析分子科学討論会、札幌コンベンションセンター、札幌 2011年9月20-23日
- (7) 中山雄一郎、松田欣之、藤井朱鳥 正イオン状態におけるメチル基の水素結合性 ～中性及び正イオンのトリメチルアミン二量体の赤外分光～ 分子科学討論会、札幌コンベンションセンター、札幌 2011年9月20-23日
- (8) Asuka Fujii, Hydrogen bond networks of water probed by large-sized clusters in the gas phase, 19th International Conference on "Horizons in Hydrogen Bond Research", Göttingen, Germany, Sept. 12-17, 2011.
- (9) Asuka Fujii, Hydrogen bond networks of water probed by large-sized clusters in the gas phase. Workshop on exploring the structure and dynamics of water at interfaces, National Center for Theoretical Science, Tainan, Taiwan. July 16-17, 2011.
- (10) Asuka Fujii, Extensive hydration structure of amino acids probed by infrared spectroscopy of large-sized clusters. The 5th symposium on "Molecular science for supra functional systems", Royton Sapporo, Sapporo, July 12-13, 2011.
- (11) Toru Hamashima, Kenta Mizuse, Asuka Fujii, Jer-Lai Kuo, Hydrogen bond ring opening and closing in protonated methanol probed by infrared spectroscopy with and without Ar tagging. 66th International symposium on Molecular spectroscopy, Ohio state university, Columbus, Ohio, USA, June 20-24, 2011.
- (12) Yuichiro Nakayama, Yoshiyuki Matsuda, Asuka Fujii, C...H...N hydrogen bond formation in trimethylamine dimer upon one-photon ionization. 66th International symposium on Molecular spectroscopy, Ohio state university, Columbus, Ohio, USA, June 20-24, 2011.
- (13) Asuka Fujii, Infrared spectroscopy of size-selected large water clusters. IMS symposium on "recent progress and prospects of cluster science and functional nano-structure science", Institute for Molecular Science, Okazaki, Japan, Jan. 7, 2011.
- (14) Asuka Fujii, Infrared spectroscopy of size-selected large water clusters, Pacificchem 2010, Honolulu, USA, Dec. 15-20, 2010.
- (15) Yoshiyuki Matsuda, Satoshi Maeda, Daichi Sakai, Ayako Yamada, Ken-ichi Hanaue, Shinichi Mizutani, Koichi Ohno, Asuka Fujii, Water and proton migrations in vacuum-ultraviolet one-photon ionization of hydrated clusters. Honolulu, USA, Dec. 15-20, 2010.
- (16) 水瀬賢太、松田欣之、三上直彦、藤井朱鳥 ラジカルカチオン状態における水クラスターの水素結合ネットワーク構造 第4回分子科学討論会 大阪大学 2010年9月14-17日
- (17) 濱島 徹、藤井朱鳥、Bing Dan, Kuo Jer-Lai プロトン付加メタノール-水混合クラスターの赤外分光 ～水素結合OH伸縮振動領域における反協同効果～ 第4回分子科学討論会 大阪大学 2010年9月14-17日
- (18) Asuka Fujii, Ionic clusters-Overview. Molecular and ionic clusters conference. Atema Kougen Resort Hotel Bernatio, Niigata, Japan, Sept. 5-10, 2010.
- (19) Kenta Mizuse and Asuka Fujii, Infrared spectroscopy of water cluster radical cations $(\text{H}_2\text{O})_n^+$ ($n=3$ to 11). OSU international symposium on molecular spectroscopy, Ohio State University, Columbus, USA, June 21-25, 2010.
- (20) Toru Hamashima, Kenta Mizuse, Asuka Fujii, Infrared spectroscopy of large-sized phenol-water clusters $\text{PhOH}-(\text{H}_2\text{O})_n$ ($10 < n < 50$). OSU international symposium on molecular spectroscopy, Ohio State University, Columbus, USA, June 21-25, 2010.
- (21) 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.
- (22) 濱島 徹, 水瀬 賢太, 藤井 朱鳥 大サイズ Phenol-(H₂O)_n($n < \sim 50$)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、2009年9月21-24日
- (23) 松田 欣之, 山田 綾子, 三上 直彦, 藤井 朱鳥 アセトン-水クラスターの真空紫外光イオン化誘起プロトンマイグレーション 第3回分子科学討論会 名古屋大学東山キャンパス、2009年9月21-24日
- (24) Asuka Fujii, Infrared spectroscopy of large-sized water networks in gas phase clusters, Symposium on Dynamics of Molecules and Clusters, Department of Chemistry, Graduate School of Science, Tohoku University, July 3rd, 2009.
- (25) 水瀬賢太、長谷川勇人、蜂谷正樹、松田欣之、三上直彦、藤井朱鳥 気相孤立系における芳香族求核置換反応中間体の赤外分光 第2回分子科学討論会 福岡国際会議場 2008年9月24-27日

- (26) 前山俊彦、吉田啓二、藤井朱鳥、三上直彦 ミクロ溶媒和負イオンの光電子脱離分光から見た“溶媒極性”の物理的背景-その1 第2回分子科学討論会 福岡国際会議場 2008年9月24-27日
- (27) 水瀬賢太、三上直彦、藤井朱鳥 プロトン付加水クラスター $H^+(H_2O)_n$ 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
- (28) 太田圭亮、松田欣之、藤井朱鳥、三上直彦 酢酸の水素結合クラスター真空紫外光イオン化検出赤外解離分光 第2回分子科学討論会 福岡国際会議場 2008年9月24-27日
- (29) 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.
- (30) Asuka Fujii, Infrared spectroscopic investigation of nanoscaled hydrogen bond networks in protonated water clusters, 物理化学コロキウム”Laser Chemistry & Nano Materials” 東北大学 2008年9月5-6日
- (31) Asuka Fujii, Infrared spectroscopic investigation of nanoscaled hydrogen bond networks in protonated water clusters, G-COE/IREMC International Meeting “Molecular Science for Future Materials and Complex Phenomena”, Tohoku University Aug. 22, 2008.
- (32) 藤井朱鳥 巨大サイズプロトン付加水クラスターの赤外分光 ～水素結合ネットワーク構造の段階的発展～ 原子衝突研究協会 第33回研究会 北海道大学 2008年8月6-8日
- (33) 松田欣之、蜂谷正樹、太田圭亮、酒井大地、三上直彦、藤井朱鳥 プロトン性分子クラスターにおける真空紫外光イオン化誘起クラスター内プロトン移動 第24回化学反応討論会 北海道大学 2008年6月2-4日
- (34) Kenta Mizuse, Hayato Hasegawa, Asuka Fujii, Naohiko Mikami, Infrared and electronic spectroscopy of nucleophilic substitution reaction intermediate cluster cations, Gordon Research Conference “Photoions, Photoionization, and Photodetachment”, Barga, Italy, Jan. 27 – Feb.1, 2008.
- (35) 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.
- (36) 松田欣之 気相クラスターの真空紫外光

イオン化検出による質量選別振動分光 平成19年度化学系学協会東北大会 物理化学コロキウム、山形、山形大学、2007年9月21日

(37) 蜂谷 正樹、松田 欣之、藤井 朱鳥、三上直彦 基本的な溶媒分子のクラスター正イオンの赤外解離分光 第1回分子科学討論会、仙台、東北大学、2007年9月17-20日

(38) 酒井大地、松田欣之、蜂谷正樹、森麻由美、藤井朱鳥、三上直彦 ホルムアミド-水クラスターの真空紫外光イオン化検出赤外解離分光 第1回分子科学討論会、仙台、東北大学、2007年9月17-20日

(39) 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、 $H^+(H_2O)_{15-100}$ 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

(40) 八木泉、前山俊彦、藤井朱鳥、三上直彦 芳香族ケチルアニオンの溶媒和発色機構に対する気相光電子脱離分光による検証 第1回分子科学討論会、仙台、東北大学、2007年9月17-20日

(41) Asuka Fujii, Infrared spectroscopy of large-sized protonated water clusters. Asia Science Forum, Sendai International Center, Sept. 11, 2007.

(他 79 件)

[その他]

ホームページ等

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

6. 研究組織

(1) 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

(2) 研究分担者

無 ()

研究者番号：

(3) 連携研究者

前山 俊彦 (Maeyama Toshihiko)

東北大学・大学院理学研究科・助教

研究者番号：20250673

松田 欣之 (Matsuda Yoshiyuki)

東北大学・大学院理学研究科・助教

研究者番号：70400223