

京都大学教育研究振興財団助成事業  
成 果 報 告 書

平成30年 1月12日

公益財団法人京都大学教育研究振興財団  
会 長 辻 井 昭 雄 様

所属部局 理学研究科

職 名 助教

氏 名 堀 尾 琢 哉

助成の種類	平成29年度 ・ 国際会議開催助成		
国際会議名	第21回化学動力学に関する東アジアワークショップ		
開催期間	平成29年12月18日 ～ 平成29年12月21日		
開催場所	コープイン京都 〒604-8113 京都市中京区柳馬場蛸薬師上ル井筒屋町411		
参加者	総数 31名	内訳 国内:12名 国外:19名(韓国6名、台湾7名、オーストラリア5名、ニュージーランド1名)	
成果の概要	タイトルは「成果の概要／報告者名」として、A4版2000字程度・和文で作成し、添付して下さい。「成果の概要」以外に添付する資料 <input type="checkbox"/> 無 <input checked="" type="checkbox"/> 有(要旨集)		
会計報告	事業に要した経費総額	1,977,500 円	
	うち当財団からの助成額	1,000,000 円	
	その他の資金の出所	(機関や資金の名称) 村田学術振興財団、人・環境と物質をつなぐイノベーション創出ダイナミック・アライアンス、参加登録費	
	経費の内訳と助成金の使途について		
	費 目	金 額 (円)	財団助成充当額 (円)
	旅費交通費	1,503,300	840,540
	会場・会議費	243,300	80,460
	要旨集製作費	79,000	79,000
消耗品費	45,799	0	
通信運搬費	4,601	0	
レセプション費	101,500	0	
当財団の助成について	(今回の助成に対する感想、今後の助成に望むこと等お書き下さい。助成事業の参考にさせていただきます。) 今回、初めて国際学会を主催する筆者にとって、貴財団から頂いた助成は非常に大きな支えとなりました。少ない参加人数にも関わらず、本ワークショップの開催趣旨をご理解頂き、助成をして頂いたことに心より感謝しております。使途に関しても柔軟で、かつ申請から助成決定までの期間が非常に短く、本ワークショップの事前準備を円滑に進めることができました。是非、今後も当助成事業を継続して頂けることを希望しております。		

## 成果の概要

### 第 21 回化学動力学に関する東アジアワークショップ

#### The 21st East Asian Workshop on Chemical Dynamics

開催地：コープイン京都 / 会期：平成 29 年 12 月 18 日 - 12 月 21 日

開催責任者：京都大学大学院理学研究科助教 堀尾 琢哉

共同開催者：名古屋大学大学院理学研究科講師 伏谷 瑞穂

：東北大学多元物質科学研究所助教 山崎 優一

化学動力学とは、物理化学および量子化学を基礎として、原子、分子、およびその集合体の動的性質（化学反応など）を論ずる学問である。1986 年（D. R. Herschbach, Y. T. Lee, and J. C. Polanyi）および 1999 年（A. H. Zewail）のノーベル化学賞が、化学動力学に関する先駆的な業績に対して与えられた事は、同学問の学術的重要性が国際的見地から高いことを意味する。

本ワークショップの目的は、東アジアにおける若手研究者に学术交流の場を提供し、化学動力学、およびそれと密接に関連する研究分野（原子分子物理、量子エレクトロニクス、レーザー分光など）に関して、多彩な視点から集中的な討論を行うことである。1997 年に、現京都大学大学院理学研究科の鈴木俊法教授が当時在籍した分子科学研究所にて第一回目のワークショップを開催し、現在は日本・台湾・韓国・豪国・ニュージーランドの若手研究者が一堂に会し、上記研究分野に関する活発な討論を行うフォーラムへと発展している。東アジア地域の学術的発展と若手研究者の相互交流を見据え、単なる講演会に留まらないよう、本ワークショップは、1) 日・台・韓・豪の四ヶ国が輪番となってホストを務め、2) 全ての参加者が研究現場の最前線で活躍する若手研究者であり、3) 参加者全員が会議室付宿泊施設に泊り込むという特徴がある。

今年で 21 回目を数える本ワークショップは、国際運営委員である筆者が誘致し、京都での開催が認められた。平成 29 年 3 月に現地実行委員会を立ち上げ、筆者が開催責任者、上記の伏谷瑞穂講師および山崎優一助教が共同開催者として参加し準備を開始した。実行委員会で協議の上、開催日と開催場所を上記の通り決定し、直ぐにワークショップ用のホームページを立ち上げ、各国代表者に周知した。平成 29 年 4 月中に各国からの招待講演者を決定し、同年 10 月 31 日を講演要旨締切日とした。講演要旨を取り纏めた後、別紙添付の講演プログラムを決定し、ホームページ上で招待講演者および座長に周知した。

初日となった 12/18(月)の午後 3 時より、参加者の登録作業を開始し、同日午後 6 時よりレセプションを開始した。参加者においては、和やかな雰囲気のもとで、研究はもちろんのこと、それ以外の話題についても活発な議論がなされた。翌日 12/19(火)の午前 9 時に筆者が開会宣言を行い、9 時 10 分より Session 1 “Electron diffraction for chemical dynamics”と題して、過渡的な分子構造を決定するための最先端の電子回折実験とその理論、さらに液滴ノズルを利用した新規な電子線回折法について議論された。続いて、同日午前中に行われた Session 2 “Theoretical studies of energy transfers”では、ナノ粒子上に形成されるプラズモン共鳴を利用したエネルギー移動の理論について、また、有機半導体における電子的過程のシミュレーションについて議論された。昼食休憩および自由討論後の、午後 3 時 30 分より、Session 3 “High-resolution molecular spectroscopy”が開始され、超音速ジェット分光によるフレキシブルな構造を持つ生体分子の構造決定、真空紫外光を用いた分子陽イオンの構造と反応性について議論された。続く、Session 4 “Applied computational chemistry & MD simulation”では、ランタノイドを利用した発光材料に関

する理論計算とそれに基づく合成指針、分子動力学を用いた生化学反応における不均一拡散運動について議論された。夕食休憩を挟んだ Session 5 “Interstellar physics and ultrafast dynamics at surfaces”では、星間氷表面から脱離する水分子の核スピン異性体比(オルソ/パラ)に関する実験的研究、超高速非線形分光で金属表面-吸着分子系の非平衡ダイナミクスを実時間観測した例が報告された。

三日目 12/20(水)の午前 9 時 10 分から講演が再開され、Session 6 “New experimental probes for bio-chemistry”と題し、単一分子分光による核酸塩基のずれ運動を観測した報告があり、さらに時間分解フーリエ赤外分光を用いた金属ナノ粒子からの赤外発光などについて議論された。続く Session 7 “Dynamics of exciton & polariton”では、有機分子結晶中におけるエキシトンポラリトンに関する理論、一次元ナノ構造体におけるレーザー発振に関する実験について議論された。昼食休憩および自由討論後の、午後 3 時 30 分より開始された Session 8 “Ultrafast chemical dynamics in condensed phase”では、極限的時間分解能を達成した時間分解インパルスラマン分光により、金錯体における化学結合生成を実時間で捉えた結果、凝縮相中における励起状態プロトン移動反応を時間分解蛍光法で観測した結果について報告があった。続く、Session 9 “Chemical dynamics of cations”では、レーザーと質量分析を利用してプロトン付加有機化合物の光化学反応を調べた結果、タンパク質イオンの断片化機構とその制御方法に関して議論された。夕食休憩後の Session 10 “Criegee intermediates”は、近年大気化学で最も重要な分子の一つとされるクリーギー中間体に関する実験および理論研究が披露された。

最終日 12/21(木)の午前 9 時 10 分からは、Session 11 “Chemical dynamics of bio-molecules”と題して、核酸塩基の紫外光耐性機構に関するレビューがなされ、また神経伝達を模した分子錯体のレーザー分光に関する研究が報告された。最後を締めくくる Session12 “Chemical dynamics in nanoparticles”では、真空紫外光電子分光によるエアロゾルの化学分析について、太陽電池の収率向上に向けて注目されているシングレットフィジョンに関する超高速分光の研究について議論された。以上で述べた講演以外においても、連日講演終了後の午後 9 時以降、参加者間での活発な研究討議が行われた。

以上の通り、化学動力学およびそれと密接に関連する研究分野に関して、多彩な視点から討論を行えたことは極めて有意義であった。特に本ワークショップでは、セッション当たりの講演を二つまでとし、さらに昼食後に自由討論時間を設けたことにより、従来のワークショップと比較して、より集中して研究討議ができたとの声が参加者より聞かれ好評であった。12/21(木)夜に開かれたバンケットをもって、本ワークショップは盛会の後に終了し、希望者に対しては、翌日の 12/22(金)に京大ラボツアーを設けてさらなる交流を図ることができた。



12/18 夜レセプションの様子



12/19 朝 開会宣言の様子