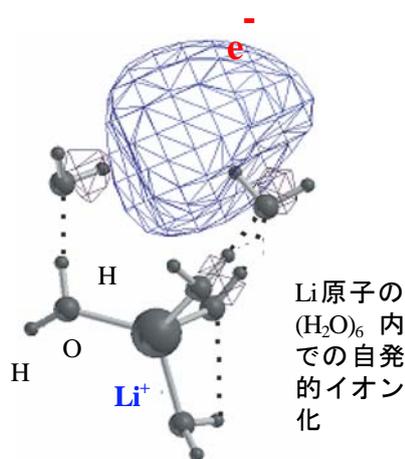


ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	1. 分子分光学および分子集合体の構造
中項目	1-7. クラスタ
小項目	1-7-1. 溶媒和クラスタの生成と電子物性

#### 概要（200字以内）

溶媒和クラスタは溶液中の溶媒和構造や溶媒和エネルギー、固液界面の相互作用の精密決定を目的として研究され、この過程で蓄積された溶質—溶媒分子間の相互作用の膨大な情報は溶液の理論計算化学の発展に資し、現在の溶液化学の定量的基盤構築に大きく寄与してきた。また溶液物性の発現に密接に関連する、クラスタ内での電子・プロトンの生成過程や溶媒和構造とそのダイナミクスの理解について、この十年間に飛躍的に進歩してきている。



#### 現状と最前線

溶質と溶媒分子からなる混合クラスタを溶媒和クラスタと呼んでおり、最も一般的なクラスタとしてその種類は非常に多岐にわたる。これらのクラスタは溶質—溶媒間の相互作用を分子レベルで解明する格好のターゲットと考えられ、種々の生成法が開発・導入されてきている。単一成分のクラスタと同様に、溶質—溶媒分子の混合気体を真空中に超音速自由噴出させる代表的な生成法のほか、溶媒クラスタと溶質分子を衝突させるピックアップ法、レーザーアブレーション法との組み合わせや、電気スプレーイオン化法等が使われている。

溶媒和クラスタは、クラスタ研究の初期から、溶液中の溶媒和構造や溶媒和エネルギー、固液界面の相互作用の精密決定を目的として研究され、金属イオンや有機・無機イオンと種々の溶媒分子の相互作用の膨大な熱力学情報が蓄積されてきた。これらの情報は溶液の理論計算化学の研究の発展に資し、現在の溶液化学の定量的基盤構築に大きく寄与してきた。また溶液物性の発現に密接に関連する、クラスタ内での電子・プロトンの生成初期過程や溶媒和構造と存在状態の理解について、この十年間に飛躍的に進歩した。<sup>1)</sup> さらにクラスタ内での電子やイオンの溶媒和過程を実時間で追跡する試みも進められ、溶液内での溶媒和電子の生成や酸化

還元反応等のダイナミックスの検証が溶媒分子をパラメーターとして実現できるようになりつつある。溶液物性と関連したクラスター内での振動エネルギー緩和や溶媒和構造の異性化の検討も始まっている。他方、イオン性固体や金属固体の溶解過程の分子レベルの理解を得る試みもなされている。また 2 eV 以下のイオン化エネルギーを有する溶媒和クラスター特有の物性を持つクラスターが発見されてきており、クラスター反応の新しい反応場として検討が始まっている。

#### 文献

(1) K. Fuke, K Hashimoto, and S. Iwata, Adv. Chem. Phys. 110, 431-523 (1999).

#### 将来予測と方向性

・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

金属イオンの酸化還元反応をはじめ化学反応に及ぼすに伴う溶媒和構造とエネルギー緩和を過渡赤外分光を用いて実時間測定し、化学反応の溶媒効果の分子レベルでの理解をさらに深める。溶媒和クラスターの構造異性化と温度の相関を明らかにし、溶液の揺らぎの問題をクラスターで検討する指針を確立する。クラスター内での電子・プロトンの溶媒和構造と輸送ダイナミックスの相関の理解を深める。

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

テラヘルツ分光等による溶媒和クラスターの低振動モードの検討や弱い分子間相互作用とそのダイナミックスの研究を進め、溶液化学や生体分子の反応で重要となる揺らぎの役割をクラスターレベルで実証し、理解を深める。

#### キーワード

溶媒和クラスター、溶液化学、溶媒和電子、金属イオン、振動エネルギー緩和

(執筆: 富宅 喜代一)