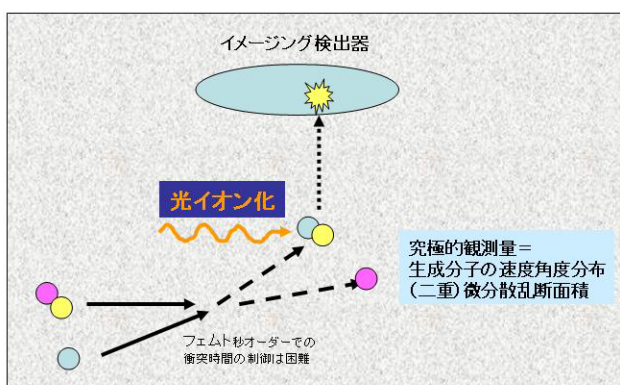


ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	2. 化学反応ダイナミクス
中項目	2-2. 反応動力学
小項目	2-2-2. 2次元画像観測による反応動力学実験

概要（200字以内）

多くの物理実験あるいは物理化学実験の究極的な測定量は微分散乱断面積である。これは、光子・電子・原子・分子・素粒子などあらゆる粒子が衝突した後の状態を記述する最も基本的観測量である。しかし、その測定は非常に困難で膨大な時間を要するものであった。散乱角度分布を一挙に観測するような画期的な検出器の開発により、このような理想的な実験が可能となり、様々な新しい実験研究の展開が行われている。



現状と最前線

電子・原子・分子・原子核などの粒子が接近・衝突・散乱する現象において、これをリアルタイムに観測する実験はほぼ不可能である。その代わりに、散乱後の粒子がどの方向にどの程度の速度でどの程度の量散乱されるのかを観測することは可能であり、この量（微分散乱断面積）が究極的な観測量となる。化学反応実験では、例えば、1986年にノーベル賞を受賞した Hershbach and Lee らの交差分子線装置では、電子衝撃イオン化質量分析器を分子線の交差点の周りに回転して、生成物の散乱角度・速度分布を測定した。しかしながら、化学反応生成物に関して、その化学種を同定し、振動回転状態を分けた上で散乱角度や速度を測定しようとすると、信号強度は極度に小さくなってしまふ。そこで、あらゆる散乱角度に放出される粒子を全て一挙に観測することでこの困難を解決する手段が考案された。反応によって生成する分子をレーザーで一度にイオン化した後、分子イオンを加速して2次元位置敏感型検出器に投影する方法である。2次元位置敏感型検出器は、マイクロチャンネルプレート・蛍光板・CCDカメラを用いたものが通常用いられ、単一時間あたりの信号強度が小さい場合は遅延線型検出器、resistive anode 検出器、バックギャモン型検出器も用いられる。

レーザーによるイオン化法としては、通常共鳴多光子イオン化法が用いられる。この方法ではレーザー光の波長を選択することで、特定の分子種の特定の振動回転状態にあるもののみを選択的にイオン化することができ、量子状態を選別した微分散乱断面積の測定を可能にする。従来の電子線衝撃イオン化法はイオン化効率が0.01%程度である為、レーザーイオン化の効率は

決してこれに劣るものではない。

過去には化学反応機構を判定する方法として、散乱分布が反応分子の初速度ベクトルに対して同方向（前方）逆方向（後方）側方に散乱する強度を比較する方法や、生成分子の振動回転分布を統計理論と比較する方法などが独立に行われたが、画像観測を用いた最新の方法論では、生成分子の内部量子状態と散乱分布を同時かつ総合的に議論することが可能となった。また、検出レーザーの偏光を利用して、生成原子・分子の検出を様々なレーザー偏光で検出し、それらの磁気量子数分布を測定することも可能になった為、生成する分子の回転角運動量の向きや原子の電子軌道の向きが検出でき、複数の電子状態を経て起こる化学反応のコヒーレントな現象をも議論できるようになった。その意義は極めて大きい。



更に最近では、高い検出感度を利用し、反応分子を分子線中で振動励起することで、振動励起分子の化学反応を微分散乱断面積レベルで解明する試みも為されている。化学反応を促進する為に、分子の並進エネルギーと振動エネルギーのいずれが有効かという問題は、Polanyi 則によって遷移状態の構造に依存することが明らかにされているが、振動励起分子の反応ダイナミクスが微分散乱断面積レベルで研究されるのは初めてであり、その知見に期待が持たれる。また、分子線が交差する角度を連続的に変えることで衝突エネルギーを変化させ、微分散断面積の衝突エネルギー依存性から、化学反応途上における量子力学的共鳴効果（Feshbach 共鳴）を検出する研究も行われている。

このように2次元画像観測法は、実験手段の一つの選択肢ではなく標準的実験手段となった。同様の装置は光解離過程・光イオン化の検出にも用いられ方法論が一新されている。電子線散乱・電子線回折・イオン分子反応にも同様の方法論が適用できる。

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
3原子系の反応における非断熱遷移を含む反応の実験と理論の完全な一致と解明
多原子分子の量子散乱計算と実験の方法論の開拓とベンチマーク研究
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
溶媒和した分子の反応ダイナミクスの実験研究と QM-MM 理論等との連携による開拓研究
(気相反応と同程度の詳細さで分子集団の反応ダイナミクスを解明する試み)

キーワード

化学反応、微分散乱断面積、角度分布、画像観測、CCD カメラ、反応ダイナミクス

(執筆者： 鈴木 俊法)