

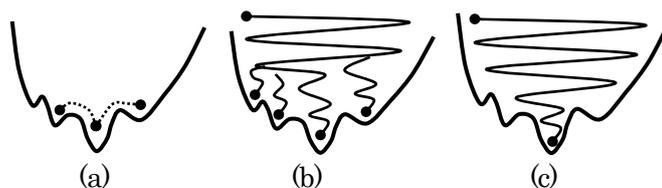
ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

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	2-2-6. クラスター反応

概要（200字以内）	
<p>80年代におけるクラスター生成、ビーム制御、レーザー技術の発達と普及により、サイズを選択したクラスターイオンの構造や反応、およびそれらの溶媒効果に関する理解は飛躍的に深まった。現在、研究対象は質量選別した中性クラスターや真空中に孤立した超微粒子にまで広がりがつつある。今後の重要な課題としては、クラスターの反応を温度の関数として理解すること、異性化やクラスター成長を追跡すること、などがあげられる。</p>	
現状と最前線	
<p>クラスターは「巨視的な物質を細かく砕いていくと、あるいは原子をつなげていくとどうなるか？」という、基礎科学における素朴で根源的な興味の対象であると同時に、現在も巨大な資金と人的資源が投入されているナノテクノロジーに直接つながる物質でもある。ここでは基礎科学研究の立場から、真空中に孤立したクラスターの反応研究に絞って、現在の潮流と今後の展望について概観する。伝統的に実験装置の開発が重要となる分野であり、今後も周辺分野の技術を貪欲に取り込みながら新しい方法論が開拓されていくことが期待される。</p> <p>最前線のキーワードとして、まずクラスターの内部状態(温度)依存性があげられる。化学反応は温度の関数であるが、微視的にはエネルギーの形態(衝突エネルギーか、電子、振動エネルギーか)に大きく依存している。ビーム実験により種々の反応における衝突エネルギー依存性は比較的詳しく研究されているが、クラスターの内部温度を制御した実験は最近始まったばかりである。例えば金属、半導体クラスターに関しては、生成した直後の高温クラスターを冷却するための種々の手段が開発されている。最近では内部温度を制御したイオンの光解離実験も始まっており、将来的には内部エネルギーを正確に規定したクラスターを用いた衝突、分光実験への発展が期待される。</p> <p>反応の時間領域に関しては、フェムト秒からアト秒の超高速反応も興味深い研究対象であるが、ここでは温度制御と関連して、クラスターの異性化に代表される低速反応に注目する。</p>	

クラスターはエネルギーが近接した多くの準安定構造を持つことが特徴で、生成条件によって異性体の分率が変化することを利用して、異性体の構造やエネルギーに関する知見が得られている(図 a)。真空中に孤立した分子やクラスターについて、異性化のような遅い反応(原子の移動そのものは遅くないので、正確には確率の低い反応)を調べるためには、長時間対象を真空中に保持する必要があるが、近年イオントラップやイオン蓄積リング等の技術が飛躍的に発展し、数十秒から分単位の遅い反応の生成物を高感度で検出することが可能になった[1]。

イオンを長時間の保持することにより、イオンの輻射冷却過程の研究が始まっており、将来的には冷却過程の制御による異性体の選択的生成へと発展が期待される(図 b、c)。



以上の研究はイオンを対象としたものであるが、中性クラスターの反応を理解することも非常に重要である。しかし、ほとんどのクラスター源において、生成するサイズの厳密な制御は不可能であり、サイズ効果の詳細を知るためには何らかの選別を行う必要がある。対象がイオンであれば質量分析が強力な手段となるが、対象が中性クラスターの場合、従来は分光学的なサイズ識別や、フラグメンテーションが起こりにくいイオン化法を適用したクラスターのサイズ分布、反応生成物の分析が行われてきた。近年はクラスターの双極子モーメントや磁気モーメントを利用して中性クラスターをサイズ選別する野心的な試みも始まっており、今後の発展が期待される。なお、サイズ選別した中性クラスターを得る方法としては他にも負イオンの電子脱離や弾性散乱による偏向を利用した方法もあり、将来どのようなブレークスルーがあるかは明らかではない。

一方、クラスターより少しサイズが大きい超微粒子については、触媒としての利用が進む一方、ナノ粒子の人体への影響が懸念されるなど悪玉としてもその地位が確立されつつある。もともとクラスターは超微粒子と原子の中間的物質として注目されていたものであるが、クラスター研究の分野で確立された方法論を超微粒子に適用することで、真空中に孤立した超微粒子の反応研究に関して新しい展開が期待される。

[1] 東他、原子分子衝突研究を目的とした液体窒素冷却静電型イオン蓄積リング、加速器 2, 443 (2005).

#### 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  
温度が規定されたクラスターの反応、遅い反応の観察
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題  
クラスターの異性化制御  
真空中に孤立した超微粒子における反応の観察

#### キーワード

クラスターの温度、孤立クラスターの低速反応、中性クラスターのサイズ分離、孤立超微粒子

(執筆者: 城丸 春夫 )