

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	2-3. 化学反応速度論
小項目	2-3-4. 配向分子線と立体化学

<p>概要（200字以内）</p> <p>特殊電磁場や高輝度パルスレーザー場を用いた分子配向制御技術が発展し、反応の立体効果の研究が発展段階にある。</p> <p>特殊電磁場を用いた手法は、衝突をともなう化学反応過程の立体効果の研究に有効であり、化学的に重要なラジカル等を対象とした研究が進められている。</p> <p>レーザー場を用いた手法は、孤立分子の速い動的過程の研究には有効であり、光解離・イオン化過程や高速電子ダイナミクス等の立体効果研究が進められている。</p>	
<p>分子配向制御技術</p>	
<p>現状と最前線</p> <p>分子の向きによる反応性やダイナミクスの差異を研究する立体化学では、向きの揃った分子（配向分子）を発生させる必要があります。このためには外場と分子との相互作用を利用する必要があります。現在、配向分子を生成する手法として、1. 六極不均一電場法、2. 強電場法、3. 超音速分子線中の衝突配列、4. レーザー励起法、5. レーザー強電場法、6. 極短パルスレーザーによる非断熱励起法等が知られています。衝突をともなう化学反応過程の立体効果の研究には、配向状態を定常的に保持する必要がありますが、原理的、技術的に極めて困難な研究課題と言えます。このため、現在のところ一般的かつ有効な手法はいまだ確立されていません。</p> <p>六極不均一電場法による配向分子線法は、不均一電場による回転状態選別に基づいており、高い配向度状態の定常的な実現が可能であるうえに回転状態が規定されている等の反応の立体効果研究に有利な特徴を備えた配向分子を生成する有力な手法です。一方で、実験装置が複雑である、分子線強度が微弱である等の実験的困難さをともなうこと、また適用可能な分子が対称コマ分子に限定される等の反応系の制約がある。このため、現在でも研究成功例は極めて限られています。現在、化学的に特に重要なラジカル等を研究対象とした研究が主に進められています。また、これまでの立体化学の実験的研究は分子-原子系の反応に限られています。また、これまでの立体化学の実験的研究は分子-原子系の反応に限られています。また、より複雑な分子-分子系の立体効果の研究も発展段階にあります。</p>	

強電場法は、強電場中で分子が振り子運動 (Pendular 状態) することを利用したもので、原理的には、双極子モーメントを持つ回転の冷えた分子 ($J \sim 0$) に広く適用可能な手法です。実験が比較的容易で分子線強度が高い等の利点がある一方で、実際に得られる配向度が極めて低いため測定される立体効果は僅かであり、また分子線条件 (回転温度) に敏感であるため、立体化学研究への適用を困難にしています。定常的な配向状態の実現が可能であるため、化学反応過程の立体効果の研究へ適用され、新しい反応系の立体化学研究が進展しています。

超音速分子線中のシードガスとの衝突による分子配列を利用した方法では、電場・磁場との相互作用を持たない分子の配列状態の定常の実現が可能です。速度選別する必要から実験装置が複雑であり、分子線条件 (回転温度) に敏感であるため立体化学研究への適用を困難にしています。定常的な分子配列状態の実現が可能であるため、化学反応過程の立体効果の研究へ適用され、他の方法で配向制御の不可能な反応系の立体化学研究が進展しています。

パルスレーザーを用いた手法は、高輝度パルスレーザー場と分子の相互作用による極短時間の配向を実現するものです。極微小領域において極短時間しか配向を保持できないため、衝突をともなう化学反応過程の立体効果の研究には適用不可能です。一方で、これらの手法は、実験が比較的容易であり、孤立分子の光化学反応過程 (解離・イオン化) や高速電子ダイナミクス等の速い動的過程の立体効果の基礎及び高調波発生等への応用研究が進展しています。

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

異方的構造を有する分子-分子反応における分子同士の相互配向に依存した反応の立体効果

d 電子とスピンを有する強相関反応系に関する反応の立体効果

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

高輝度な CW レーザー技術と融合した配向制御法の開発と応用

新しい原理に基づく複雑系・凝集系に適用可能な新規配向制御法の開発

キーワード

配向分子線、立体効果、六極不均一電場、Pendular 状態、レーザー場

(執筆者: 大山 浩)