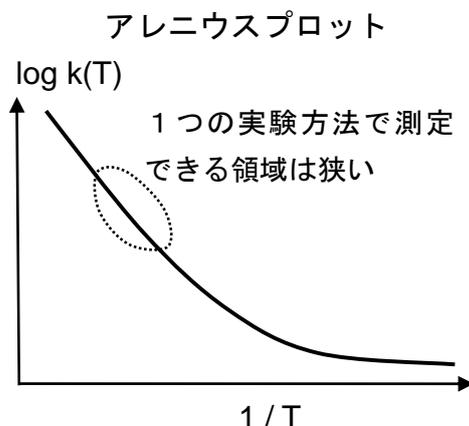


ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

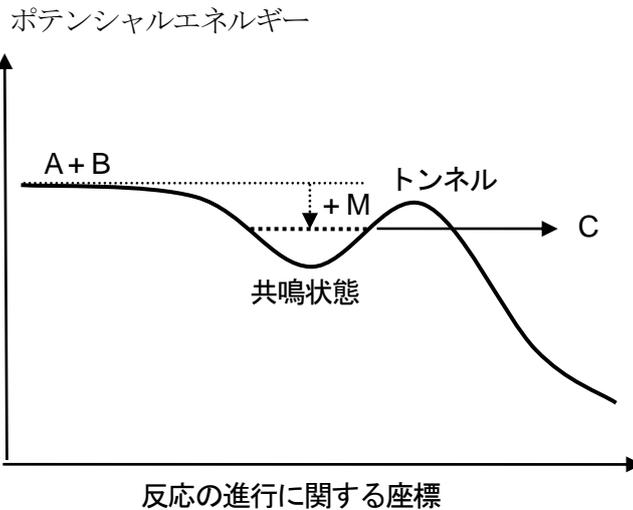
大項目	2. 化学反応ダイナミクス
中項目	2-3. 化学反応速度論
小項目	2-3-8. 極低温分子の反応速度論と量子効果

概要（200字以内）	<p>温度が低くなると量子力学的なトンネル効果によって反応速度定数がアレニウス則からずれてくることは長年理論的に予想されてきたが、それを実験的に実証した例はほとんどない。しかし、低温での反応速度を知ることは、環境問題に関わる大気反応、宇宙の創世に関わる星間分子反応など、幅広い分野で極めて重要な課題である。今後、低温を含めた幅広い温度範囲における反応速度の測定技術の進歩が必要不可欠である。</p>
------------	---



現状と最前線	<p>我々人類が化学反応によって物質を合成する場合、温度を上げて反応を速やかに進行させることが多いのは言うまでもない。温度を上昇させると反応速度が増加することを経験的に知っているからである（アレニウス則）。では、逆に温度を下げていけば化学反応はどうか？残念ながらこの素朴な疑問に答えられるだけの十分な研究成果を我々は手にしていない。しかし、低温での反応速度の振る舞いを知ることは我々にとって重要な課題である。実際、成層圏でも最低の温度は220Kになり、その上層部にある中間圏では、高度によって170Kまで下がる。にも関わらず、低温での化学反応の研究は全く遅れている状況にある。主な原因は実験技術の問題にある。現在の技術では、近い将来、反応物の減少に伴う反応速度を測定することが可能になるかもしれないが、同時に生成物の時間変化までも測定するには相当の進歩が必要と思われる。</p> <p>さらに100K以下の低温の世界になると、さらに上層の大気や星間分子の反応の解明といった研究テーマが関連する。特に、星間分子の分野では、温度10-20Kでの化学反応が極めて重要な役割を果たす。そのため、そうした極低温での反応速度定数の測定が、イギリスやフランスで行われているが、根本的な実験的問題もある。例えば、超高真空下では、温度一定という平衡条件をつくって測定すること自体が大変困難である。また、測定できる反応速度の絶対値も限界があり、反応が早すぎても、遅すぎても測定ができない。</p>
--------	--

こうした実験的な困難が解決されれば、反応の理論的な理解も格段に進歩することが期待できる。低温での反応を議論する際に最も重要な鍵となっているのが、トンネル効果と共鳴効果からなる量子効果である。また、その際、原子分子同士に働く長距離引力相互作用が重要な役割を果たすと考えられている。図に量子効果の概要を示す。ここでは、AとBという分子からCが生成する過程を考えている。低温低圧



では、図で示したような共鳴状態を一旦経由し、トンネル効果を経て生成物Cが生成すると考えられているが、根拠となる実験事実は存在しない。観測から知られている成層圏のオゾンの同位体濃縮は、このような機構で起こるのではないかと推測されているが、詳細はまだ明らかになっていない。

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  
気相中で広い温度領域で反応速度定数が測定できる実験技術の開発
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題  
生成物の時間変化、分岐比を測定する実験技術の開発

キーワード

トンネル効果、共鳴効果、大気反応、星間分子

(執筆者： 高柳 敏幸 )