

分子クラスター、遷移状態の構造選別と立体反応ダイナミクスの解明： 新しい化学反応論の構築をめざして

関連領域研究系分子クラスター研究部門 笠 井 俊 夫

分子配向は化学反応において制御すべき、最後に残された重要なパラメータです。このパラメータは、反応速度や分岐をゼロにも百パーセントにもする大きな反応制御の潜在力を持っています。また別の課題としてクラスターの構造と、クラスター化による化学反応性に及ぼす影響の系統的解明が必要となってきました。とりわけクラスター反応を分子レベルで詳細に理解するにはクラスターのサイズと構造異性体を何らかの方法で選別して反応を観察しなければなりません。

流動期間で予定している研究計画は次のような内容です。

分子線を用いたレーザー蒸発法により有機分子と金属原子とを人工的に組み合わせる有機金属錯体など新規な中性クラスターを合成し、六極電場法を用いてそのサイズと構造を非破壊的に選別し、引き続きクラスターの配向制御を行います。一方、直線偏光レーザー励起法によりラジカル・分子のアライメントを行い完全配向状態で反応を実現します。さらにAB+CD二分子反応の遷移状態化学種[AB...CD]は広い意味での分子クラスターとみなせますので、その幾何構造は反応分岐を決定する要因です。従って、その構造選別を行い反応のActive Controlを試みます。これらの研究から新しい化学反応論の展開と近い将来の反応制御の新しい方法論の確立を目指します。

以上のようなレーザー蒸発法で合成した新規な分子クラスターの構造選別と立体反応ダイナミクスの解明に加えて、水素結合型のハロゲン化水素クラスターに関しても同様の構造と反応性の解明を行いま

す。例えばHClなどのハロゲン化水素二量体クラスターはトンネル反転運動を伴うL型分子構造を持っていますがホモとヘテロダイマーではトンネル運動速度は極端に異なることを私たちは明らかにしました。このトンネル反転運動速度の違いが化学反応にどのように影響するのかについて調べることで、クラスター化における量子効果を解読できます。

このように、分子配向をコントロールして原子・分子レベルの基礎解明の研究過程において見出された法則に基づいて近い将来、反応を制御する新しい方法論を確立することができるのではないかと期待されます。このような一見遠回りに思える基礎研究が、将来の新しい生産と技術の発展を促すことができ、これがいわゆる自然現象を「理解 (post-dict)」し次にそれを「予測 (pre-dict)」するサイエンスの不可欠な両輪で、両者がそろって初めてサイエンスとして成りたつのではないかと考えています。

これらの研究成果に基づいて、従来のエネルギーを主とする反応論から、分子構造と結合状態の変化のありさまを時間・空間的にトータルに解読するベクトル的な「立体反応ダイナミクス」の新しい反応論へと進化することができます。大気反応や燃焼反応、そして物質を合成する多くの表面反応が原子・分子レベルで議論されようとしている今日、立体反応ダイナミクスあらゆる分野では益々その重要性が認識されるでしょう。

平成12年4月、蔡徳七助手と修士2年生の橋之口道宏君と共に「夢とロマン」を求めて岡崎に寄せていただいてからすでに半年以上過ぎ去り、歳月の



矢のような速さを改めて実感する次第です。幸いその間、新しい配向分子ビーム反応装置の立ち上げも順調に進み、また10月からは分子研フェローの清水雄一郎さんも私たちのグループに加わっていただきお陰様で順風の船出と言えます。分子研の研究環境と研究サポート体制のすばらしさは、確かにその恩恵を受けてみないとわからないもので、このようなよき伝統はこれからも末永く続けていただければと願っています。

現在、全国の大学・研究所等に独立法人化の嵐が吹き荒れています。そんな時期に私たちは、たまたま流動で大学の理学部から分子研に転任したものですから、否応なしに「研究所における研究とはなにか?」とか「分子科学とは何か?」という基本的な問題についても考えざるを得ない状況となっています。私たちの研究分野は物理化学ですので、分子科学が現在、節目であるならば即ち物理化学も節目であるのと同義です。分子研が日本の分子科学の象徴的存在であるだけに、ひとたび分子研が分子科学の将来方向に関して判断を間違うと、大学の理学的な分子科学の研究も風前の灯火となるのは予測できます。「研究の評価」という名において、研究の収支決算をするのは結構ですが、問題は研究が基礎的で、応用的なものでなければならないほど「貨幣の交換率」が誰にもわからないところでしょう。言い換えれば今日の問題は、ギリシャ神話にあるプルートーンや冥界の諸神たと自認する人達が余りにも世間に多くおり、我こそは「研究の評価」ができると信じていることでしょう。歴史を振り返れば、偉大な発見や発明は、多くの場合地道で絶え間ない好奇心の追求

の途上に来る偶然の産物であり、またそれらの真の評価は時として百年のオーダーを必要とするという、この簡単な事実を認める謙虚さの欠落かも知れません。

また別の話になりますが、研究の進め方には「探偵型」と「アマゾン型」の二つの方法があると言った人がいます。「探偵型」研究は論理と推理を駆使して犯人を見つけ出すタイプの研究です。「アマゾン型」研究は理論を必要としますがどちらかといえば直観と信念をたよりに、未踏のジャングルをさまよう探検的なものです。この夢とロマンの探検こそが「分子科学の理想」であり、かつてはそれが実行されていたと思うのですが、この意味において現在の分子科学が一体どれだけそうであるのかわかりません。いずれにしても「分子科学の理想」は理想で終わらせてはならない理想であると思います。