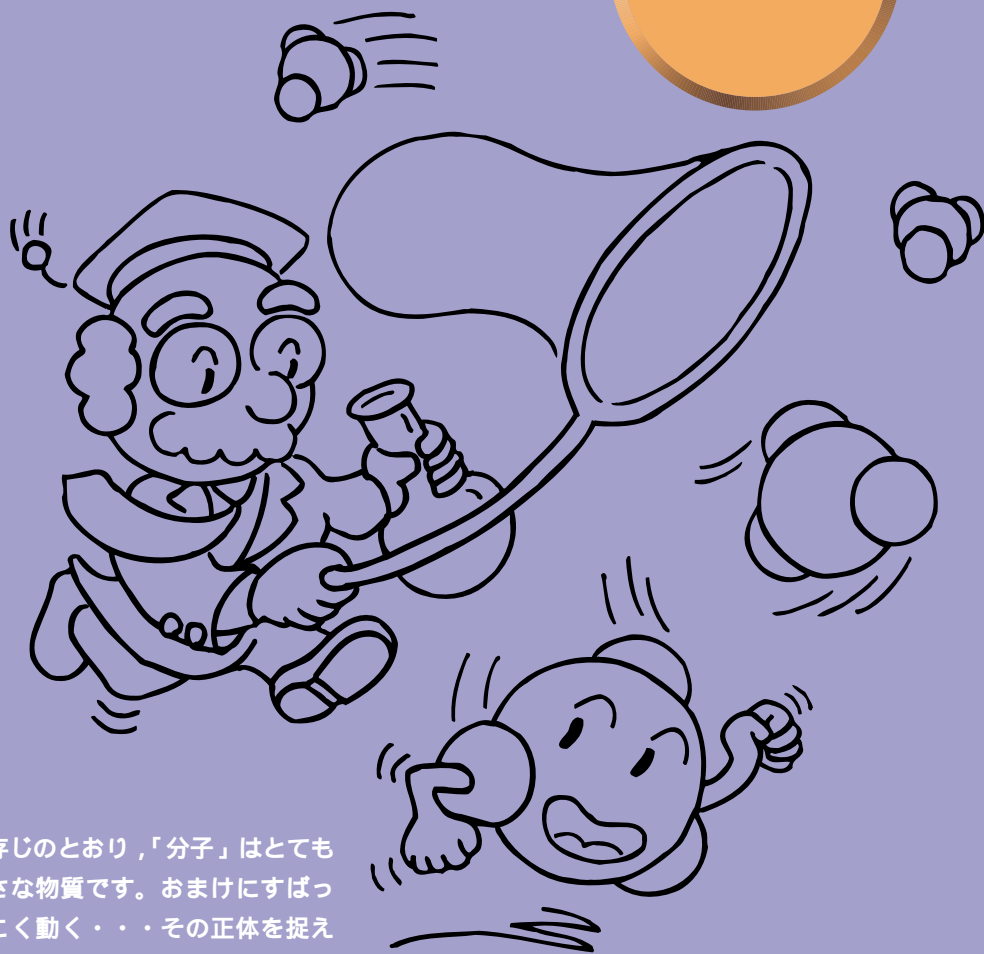


分子を捕まえる！

分子物性



ご存じのとおり、「分子」はとても小さな物質です。おまけにすばしこく動く・・・その正体を捉えるにはとてもやっかいな相手です。しかし、科学者も負けてはいませんでした。

さまざまな工夫を凝らし、分子を「捕まえる」ことに成功しました。科学者がこしらえた「仕掛け」とはどんなものなのでしょう？

化学

分子の反応過程を追う

分子が吸収したり，放出したりする光の波長を調べる（分光する）ことで，分子の検出，分子構造の決定などができます。またレーザーなどの技術的進歩によって，化学反応が進行する最中の原子や分子の動きを，実時間（1/1兆秒の時間分解能）で追えるようになりました。

その結果，「分子が変形し結合を組み替えて生成物を生み出していく」反応の過程が，詳細に明らかになりつつあります。

特異な構造の分子を創る

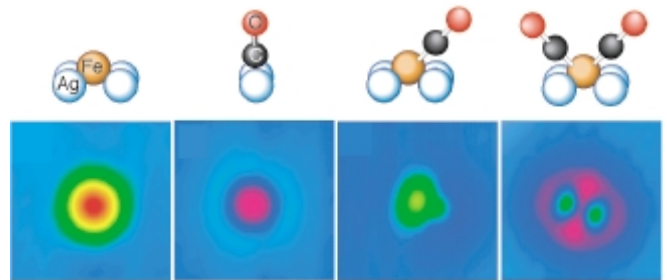
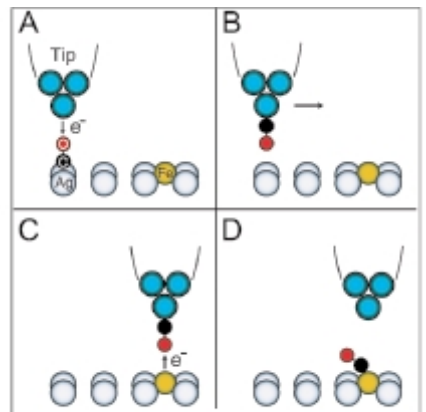
高電圧で放電したプラズマ中には通常は存在しない様々な分子ができます。たとえば水素分子とメタンの混合ガスを放電すると，正電荷を帯びたイオン分子が多数生成します。その中には CH_5^+ という古典的には考えられない分子も存在することが，吸収される光の波長の解析から明らかにされています。このように通常安定には存在しない分子の構造やエネルギー状態を明らかにするうえで分光学は威力を発揮します。その成果は，宇宙空間に存在する多様な分子の同定に役立っています。



水素ガスの放電

原子・分子一つ一つの制御

原子・分子を一つ一つ操作して，望みの物質を作り上げることは可能でしょうか？ そのような試みが今まさに始まっています。例えば，銀表面上に吸着した一酸化炭素分子を一つずつ動かして，別の場所にある鉄原子と反応させることに成功しました。生成した FeCO 分子や $\text{Fe}(\text{CO})_2$ 分子は，走査トンネル顕微鏡によって識別し，構造を決定することができます。



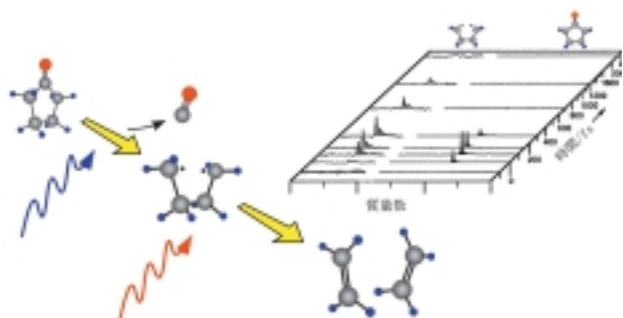
走査トンネル顕微鏡で得られる画像

分子の動きを直接見る

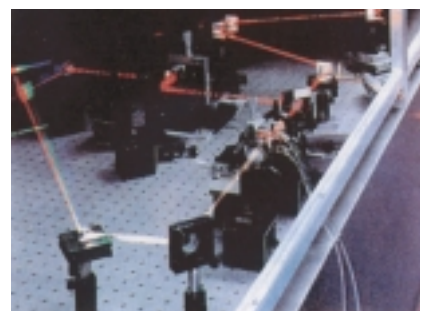
最新の超高速レーザー技術を用いると，化学反応の途中の分子の動きをリアルタイムで追跡することができます。たとえば，環状の有機化合物

$\text{C}_5\text{H}_8\text{O}$ が開裂して，2つの C_2H_4 （エチレン）と CO が生成する反応では，10兆分の1秒以下のパルス幅のレーザー光を用いることで，まず CO がはずれて

不安定な中間体の C_4H_8 が生成し，引き続きエチレンへと解離していく様子がリアルタイムで観測できる様になりました。



環状の有機化合物 $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}$ が開裂して，2つの C_2H_4 （エチレン）と CO が生成する反応の様子



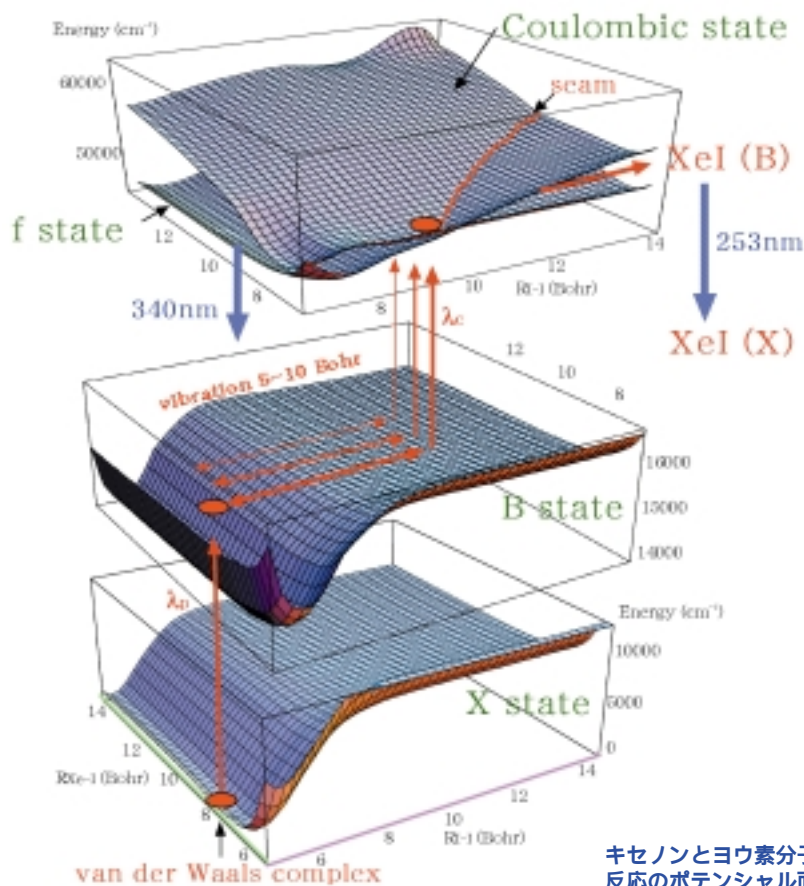
超高速レーザーシステム

コンピュータで分子を見る

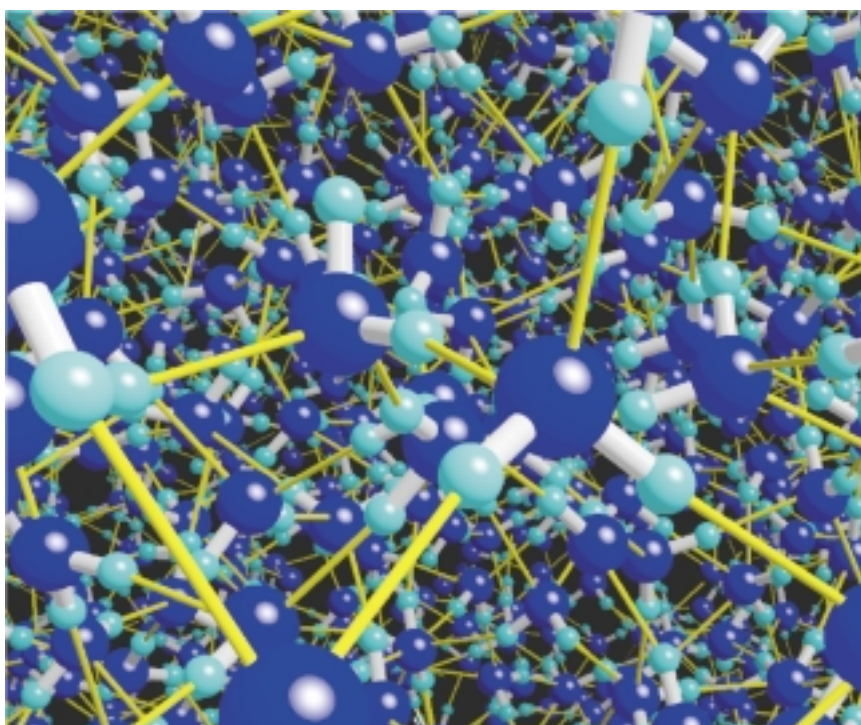
分子が形を変える化学反応は、身の回りにも多く見られます。最近では、こうした動きが理論的計算によって直接「見える」ようになってきています。

反応動力学

化学反応の途中では実際に何が起きているのか？それを実験でつかまえることは一般に非常に難しく、理論計算が特に必要とされる問題です。この図はその一例となるポテンシャル・エネルギー面を示します。これは現代の理論化学計算から求められました。キセノンXeとヨウ素分子 I_2 からなるクラスターが紫外線を吸収すると、電子励起状態に上がり、最後にXeIとIに分解していく過程では、ポテンシャル面の交差を通過することがわかります。



キセノンとヨウ素分子の反応のポテンシャル面



コンピュータで得られた水の水素結合ネットワーク

水

図はコンピュータで得られた水の水素結合ネットワークを示します。酸素原子（図では青色の球で表現）と2個の水素原子（水色の球）からなる水分子は、水素結合と呼ばれる弱い相互作用（図では黄色の細い線で表現）によって相互に結びつき、3次元的なネットワークを形成しています。この水素結合ネットワークは、4度Cで体積が最小になるといった水特有の性質や、雪の美しい結晶構造の根源です。また、生体内で水素イオンを輸送する経路となるなど、生物が生きていく上で重要な機能を担っています。コンピュータを用いた分子動力学計算により、こうした分子の動きが、一個一個明らかにされています。