

【基盤研究(S)】

理工系(化学)



研究課題名 フェムト秒時間分解X線溶液散乱による分子構造の超高速ダイナミクスの直接観測

高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・教授

あだち しんいち
足立 伸一

研究課題番号: 17H06141 研究者番号: 60260220

研究分野: 放射光科学、物理化学

キーワード: 超高速ダイナミクス、構造科学

【研究の背景・目的】

「百聞は一見に如かず」の言葉の通り、溶液化学反応中の分子構造変化を実験的に直接観測することは、化学者の夢である。本研究課題では、この化学者の夢の実現を目指して、新しい時間分解 X 線計測法と解析手法を開拓する。

これまで溶液中の超高速化学反応の計測には、主に赤外から紫外域における時間分解分光法が用いられてきたが、これらの時間分解分光法は価電子帯の電子状態や分子振動に関する情報を与える一方で、分子構造に関しては間接的な情報を与えるのに限定される。液相の分子構造に関する直接的な情報を与える最も有力な測定法は、分子内の結合長と同程度の波長を有する X 線による回折・散乱現象を利用した時間分解測定法である。本研究課題では、フェムト秒～ピコ秒オーダーの時間分解 X 線溶液散乱法を用いることにより、液相の超高速な分子構造変化を直接観測する。

【研究の方法】

これまで液相の超高速化学反応計測において、多くの場合、赤外から紫外光が使用され、X 線が使われていなかったのは、計測に適したパルス X 線光源が実在しなかったことによる。しかしながら近年、フェムト秒オーダーの極短パルス幅を有する X 線を発生させる X 線自由電子レーザー (X-ray Free Electron Laser, XFEL) が日本、米国を始めとする

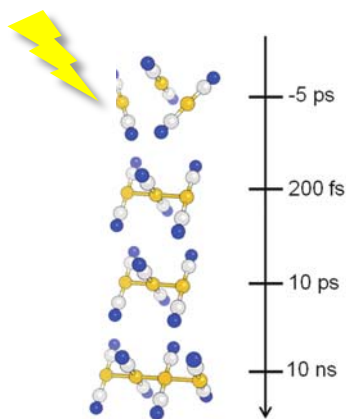


図 1: シアノ金錯体の光反応に伴う分子構造変化

世界各地で建設され、X 線領域での干渉性や短パルス特性を活かした先端研究が急速に発展している。本申請は、従来の蓄積リング放射光源から得られるピコ秒 X 線と、XFEL 施設から得られるフェムト秒 X 線を相補的に活用して、液相での化学反応におけるコヒーレントな分子振動から分子構造変化まで、X 線散乱法により直接観測することを目指すものである。これまでに我々は、シアノ金錯体 ($\text{Au}(\text{CN})_2$) の水溶液系において、光励起後に金原子間に結合が形成する過程を時間分解能 0.5 ピコ秒で観測することに世界で初めて成功した (図 1)。このシアノ金錯体の時間分解 X 線溶液散乱の研究結果が、本申請の全体構想の出発点となっている。

【期待される成果と意義】

時間分解 X 線溶液散乱法は、分子構造に関する直接的な情報を与える手法であるという点で、他の時間分解分光法と相補的であると同時に、極めてユニークな測定手法である。この実験手法を広く液相の光化学反応に適用することにより、基礎化学における計測のための新たな基盤技術を創出し、「液相における超高速分子構造科学」の新分野創成を牽引する。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

"Direct observation of bond formation in solution with femtosecond X-ray scattering"

Kim, Kim, Nozawa, Sato, Ihee, & Adachi *et al.*
Nature, 518, 385-389 (2015).

"Synchrotron-Based Time-Resolved X-ray Solution Scattering (Liquidography)"

S. Adachi, J. Kim, & H. Ihee
Advances in Lasers and Electro Optics, Nelson Costa and Adolfo Cartaxo Ed., (2010) ISBN: 978-953-307-088-9, INTECH.

【研究期間と研究経費】

平成 29 年度～33 年度 154,400 千円

【ホームページ等】

<http://www2.kek.jp/imss/pf/shinichi.adachi@kek.jp>