

第3分科会

テーマ「ラジカル分子の反応と分光の基礎」

講師 理化学研究所 高口 博志

担当校 東京工業大学資源化学研究所 藤井研究室 辻 典宏

武田 朗宏

二分子反応 ($AB+C \rightarrow A+BC$) は、多様な化学現象の中でも、最も基本的で重要な化学過程の一つですが、通常室温程度のエネルギー条件下では、その担い手(反応物、生成物)のほとんどはラジカル分子(原子)です。化学活性種であるラジカル分子は、その不対電子の存在に由来して開殻電子構造を持ち、これによる特有の内部エネルギー準位構造(微細構造)を形成しています。一方、これら微細構造を形成する各状態の波動関数は、化学反応ポテンシャル曲面と密接に関連して反応性を特徴づけます。スピン軌道状態に代表されるラジカル分子の内部状態を露わに取り入れた化学反応理論の枠組みは、20年以上前からすでに提唱されていましたが、実際の反応系に対して、その反応メカニズムが厳密かつ定量的に解明され始めてきたのは、最近の高精度量子化学計算の発展と反応動力学の実験手法の革新によるものでした。化学反応理論の古典とも言える遷移状態理論は、マクロスコピックな反応速度定数を予測・説明するために広く適用されてきましたが、分子の核運動レベルからの反応機構の理解は新しい展開の時期を迎えています。“State-to-State Chemistry”という言葉の、最先端研究のためのキーワードとしての効力は、例えば10年前に比べれば相対的に小さくなっているのかもしれませんが、しかし、化学反応を素過程として分子論的に理解するためには、この言葉が指す内容の重要性は普遍的であり、同時に“分子の物理”を理解するための豊富な題材を含んでいます。

本分科会では、ラジカル分子の静的側面(エネルギー準位構造;ラジカル分光学)と動的側面(反応性と反応機構;反応動力学)の両方を取り上げ、化学反応素過程をラジカル分子の衝突・散乱問題として理解するための基礎的な内容を解説します。具体的には、内部状態を考慮した量子散乱の基礎、ラジカル分子の微細構造(相互作用)と波動関数(Hund's cases)、全反応と半反応(光解離反応、光イオン化過程)、状態選別非弾性・反応性散乱、を中心にして、実際の反応系を対象とした研究論文(理論、実験)も参照しながら、議論を進めていきたいと思いをします。

担当校より一言

第三分科会では理化学研究所の高口先生をお招きして、ラジカル分子の反応と分光に注目した講義をしていただこうと思いをします。通常室温程度のエネルギー条件下における重要な要素にラジカル分子があげられます。そこで本分科会では、そのようなラジカル分子の基礎的な部分に切り込んで行こうと思いをします。

今までにこの分野の勉強をする機会があった人は少ないと思うので、今の分野にこだわることなく、修士やB4の方々を中心に是非参加していただきたいと思いをします。

みなさんとともに活気ある分科会にしていきましょう。