

X線分子動画による化学結合形成に伴った 分子生成過程の可視化

Visualization of birth of molecules by a molecular movie with X-rays

野澤俊介・KEK 物構研 PF

放射光[1]とXFEL[2]の量子ビーム X 線を利用してナノ秒からフェムト秒までの時間分解 X 線散乱測定(図1)を行った。光によって誘起された化学結合形成によって、分子の構造が時々刻々と変化し分子が生成していく過程を、分子動画として実時間観測することに成功したので報告する[3]。

超高速時間分解測定によって会合体内反応の進行を追跡することは、化学反応研究の“究極”を目指す試みである。それは、水素結合や親和性等の弱い分子間力で複数の分子が結びついた分子会合体は、反応が拡散律速で制限されることなく、初期分子配向や反応に関与する分子の数を定めることができるため、反応機構研究における理想的な始状態を持つためである。

量子ビーム X 線と高精度に同期したパルスレーザー光を溶液中の会合体サンプルに照射して反応を開始させ、一定の遅延時間後に X 線パルス照射して反応中間体を X 線散乱シグナルとして測定する。X 線散乱曲線をフーリエ変換して得られる動径分布関数は、原子間の結合距離を直接与えるため、化学反応を分子構造変化として把握できる。そのため、分子構造論に基づいた化学反応の実時間観測が実現される。まさにこれは化学反応式における“→”の「可視化」であり、量子ビームを用いた超高速動的な研究は化学反応機構の詳細について新しい理解をもたらす。

[1] S. Nozawa *et al.*, *J. Synchrotron. Rad.*, **14**, (2007) 313.

[2] T. Ishikawa *et al.*, *Nat. Photon.*, **6**, (2012) 540.

[3] K. H. Kim *et al.*, *Nature*, **518**, (2015) 385.

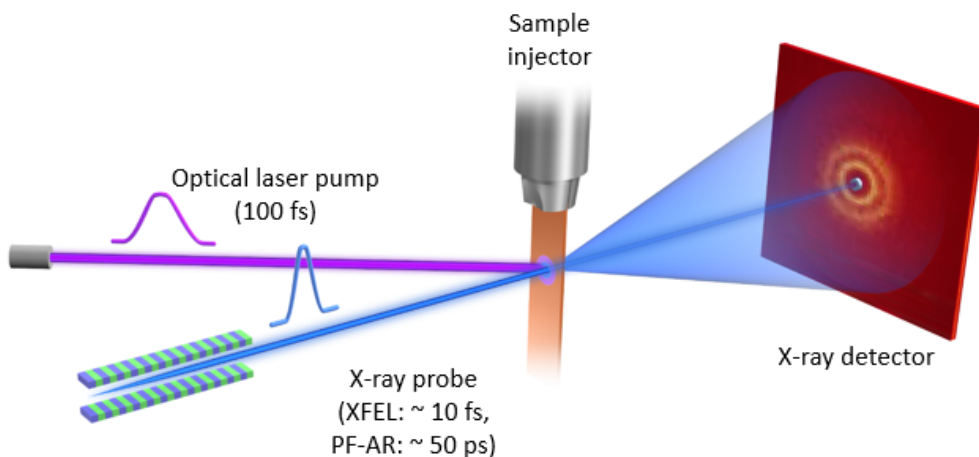


図1 量子ビーム X 線を利用した時間分解 X 線散乱測定の概略図