



## 分子内を歩き回る水素の姿を捉えた！－化学反応の新しいルート「ローミング過程」の可視化に成功－

人間と同じように、分子も目的地に向かってまっすぐに進みます。でも、人間と同じように、分子も寄り道をすることがあるんです。

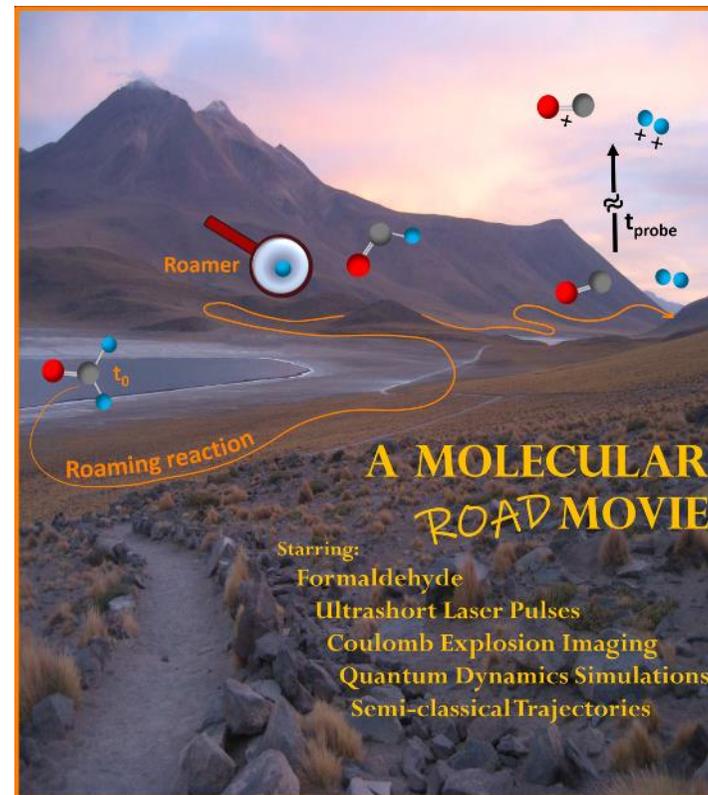
通常、化学反応は反応物と生成物の間にあるエネルギー障壁が最も低いルートを通して進行する、と考えられています。これは、人間が悪路ではなく整備された道を通ることに似ています。ところが、2004年にホルムアルデヒド分子( $\text{H}_2\text{CO}$ )には、エネルギー障壁が最も低いルートを通らない新しい反応ルートが存在することが分かりました。これは、ホルムアルデヒド分子中を水素原子(H)が歩き回り、別の水素原子と結合することで、最終的に水素分子( $\text{H}_2$ )と一酸化炭素分子( $\text{CO}$ )に解離する反応ルートで、水素原子が分子内を歩き回る様子(roaming)から「ローミング過程」と名付けられました。「ローミング過程」は山道をふらふらとさまよいながら下りるようなムダの多いルート(右図)です。近年、アルコールや酸化窒素など様々な分子にもローミング過程が存在すると言われており、これまでの化学反応とは異なる特徴を持った分子内反応として注目されています。

今回、フェムト秒レーザーを利用してホルムアルデヒド分子の解離反応の時間分解計測を行い、分子内を歩き回る水素の姿を捉えることに世界で初めて成功しました。今後、ローミング過程の理解に基づいた反応シミュレーションの進展やローミング過程を利用した新しい化学反応の探索が期待されます。本研究成果は、2020年11月27日に『Science』に掲載されました。<https://science.sciencemag.org/content/370/6520/1072>

詳しくは、QSTプレスリリースのWebサイトおよび一般向けの説明動画「ホルムアルデヒド分子が辿る路」をご覧ください。

(プレスリリース <https://www.qst.go.jp/site/press/46129.html>)

(ホルムアルデヒド分子が辿る路 <https://youtu.be/HvUCNDFfH-w>)



可視化に成功した「ローミング過程」のイメージ。歩きやすい「道」だけではなく、いろんな場所を通りながら化学反応が進行します。