

レーザー光が引き起こす分子内電子分布の超高速変化を捉えた！
 - 化学反応の「オンデマンド制御」実現へ前進 -

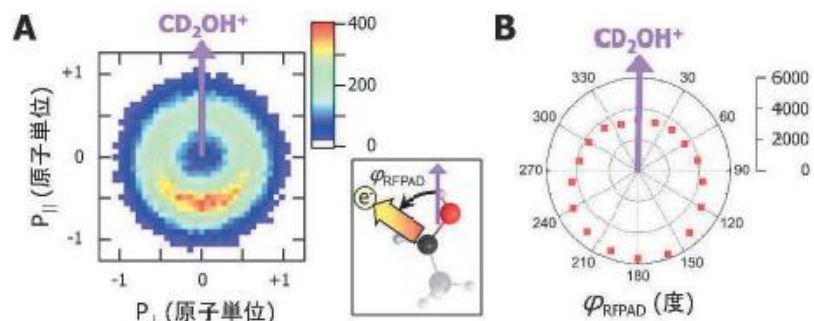


図1 A: エタノール分子から放出された電子の2次元運動量分布【解離イオン(CD₂OH⁺)の放出方向を上向きとした。】
 B: 2次元運動量分布から算出されたイオン化の分子座標系角度分布【中心からの距離が、角度φ_{RFPAD}におけるイオン化確率に相当している。】

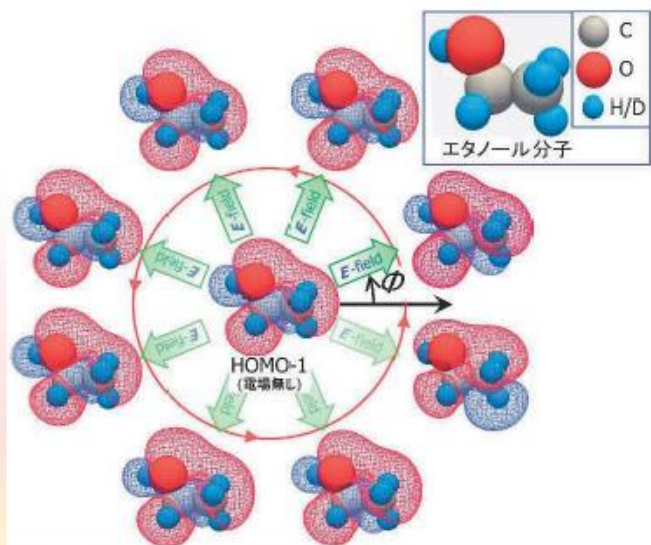


図2 エタノール分子(右上図)の分子軌道の1つ(HOMO-1)の理論計算結果【中央はレーザー電場が無い時の分子軌道、その周辺がレーザー電場下における分子軌道の様子。】

分子の中では、原子どうしをつなぐ役割を電子が果たしています。分子の中で電子がどのような分布をしているかを意味する分子軌道の形によって、分子の状態や化学反応の起こりやすさが決まります。レーザー光は電磁波であり、その電場によって分子内の電子の状態、すなわち分子軌道に直接働きかけることが可能です。分子軌道の形は、レーザー光に晒された際に、分子の各場所から電子が飛び出す確率を測定することで明らかにされてきました。しかし、分子軌道の変形を明確に捉えた研究例はありませんでした。



そこで本研究チームが開発した、レーザー光に晒された分子から放出される電子とイオンの方向と速度を精密に計測する装置を使用して、エタノール分子を対象とした測定を行いました。レーザー光を照射して飛び出した電子とイオンの計測を行い、それぞれの方向、速度データを精密に処理した結果、分子の各場所から電子が飛び出す確率を、非常に高い精度で求めることに成功しました(図1)。実験で得られたデータを、量子力学に基づく理論計算で検証することで、図2に示すように、振動するレーザー光の電場に応答して分子軌道の形が変化していることを世界で初めて実証しました。

本成果は、化学結合の出来やすさを決める分子軌道の形を、レーザー光を使って直接操作できることを意味しています。この成果は将来、「分子内のこの結合を切りたい」「ここに化学結合を作りたい」などの要望に合わせて化学反応を起こす「オンデマンド制御」による、革新的な化学物質創製技術につながると期待されます。

本研究成果は、2019年5月18日に発行されたアメリカ科学振興協会(AAAS)のオープンアクセス速報誌 Science Advances (H. Akagi, T. Otobe, R. Itakura)に掲載され、プレスリリースを行いました。

<https://www.qst.go.jp/site/press/25368.html>

【光量子科学研究部 超高速光物性研究グループ 赤木 浩】