

平田研究室

溶液化学反応のメカニズムとダイナミクス

調べようとしていること – 溶液中でどのようにして化学反応が起るか –

- ☞ 溶液中の分子間のエネルギーのやりとりと反応の活性化
- ☞ 液体のダイナミクスと特徴 – 不均一性・多体相互作用
- ☞ 溶媒和ダイナミクス
- ☞ 高極性溶媒中の光イオン化および光誘起電子移動過程

どうやって、何を調べるか

化学反応はものが時間とともに変化する過程
時間軸を含む研究手法が必要

研究手段はピコ秒・ナノ秒パルスレーザーを用いた過渡吸収、蛍光、光電流測定と計算機シミュレーション。

多くの有用な反応は凝縮系で起る。特に溶液反応は種類も多く、様々なところで用いられる。反応機構の研究のためには、気相のように密度が低く、分子間相互作用が弱い系の方が詳細な研究を行いやすい。溶液では相互作用が複雑で強いため、気相のように反応の細かいメカニズムを調べることは容易ではない。しかし、気相では起りにくい反応、溶液中でしか起らない反応も多く、こうした反応のダイナミクス・メカニズムの研究は重要である。

溶液は密度が高く、分子の衝突頻度が高いのでエネルギーが失われやすい。また多体相互作用が本質的な役割を演じるため、分子の挙動が複雑になる。しかし、そのために極めて興味深い現象も起る。我々はどのようにして反応に必要なエネルギーが一つの分子に集中するのか、反応が溶媒に誘起されるとはどのようなことなのかを調べる。

溶液反応の研究には溶液の特徴を知ることから始めなければならない。固体とは異なり、液体ではその内部を分子がかなり自由に移動する。これには協同運動と分子運動間の相関が重要である。分子が出会う過程が律速になる反応の多いことからわかるように拡散過程も大事な研究テーマであり、これについても種々のシミュレーションを行っている。

これまで特に力を入れてきた光イオン化は溶媒の配向によりイオン化状態が大きく安定化されることで起きる。したがって、溶媒ダイナミクスを強く反映すると考えられ、今後さらに多くの系で実験・シミュレーションを行い研究を進めたいテーマである。