

原子トンネル反応 研究グループの発足

原子トンネル反応研究グループ

宮崎 哲郎

原子トンネル反応研究グループが5年間の研究プロジェクトとして本年4月に発足した。グループの構成は、筆者（名大、低温化学）をリーダーとし、原研の専任スタッフ2名、専門研究員1名の計4名である。原子トンネル反応は新しいテーマであると同時に各分野に関連した多面的テーマである。本構成員の専門分野も多岐にわたり、今後の研究の展開が楽しみである。さらに、研究嘱託として平岡先生（山梨大）、塩谷先生（広島大）、市川先生（北大）に御助言・御協力をお願いしている。主な装置として極低温・温度可変（2～300K）・時間分解（～μsec）ESRを設置し、試料さえ持ってくれば誰でも測定出来るようにしたい。これを使った極低温化学やトンネル反応に関連した共同研究を大いに歓迎する。既に国外（ロシア2件、ベルギー1件）から共同研究の申し入れがあり、実施の可能性について検討を始めている。

原子トンネル反応研究の意義を簡単に述べる。化学反応の研究として、第1に化学反応が起こる過程をレーザーフォトリシスなどを用いて短時間測定により観測する方向がある。第2に反応物と生成物との量子状態等を規定して化学反応を起こし、反応を精密に検討する方向がある。両者共にアメリカを中心とした欧米で始まり発展してきた方向であり、現在では日本も含め研究の主要な流れとなっている。第3の課題として、反応物がどのように生成物になるかという点がある。アレニウス以来、化学反応は活性化エネルギーというエネルギー障壁を越えて起こるとされてきた。アイリングは絶対反応速度論を構築する際に、原子が波動性に基づく量子トンネル効果によってエネルギー障壁を透過し反応する可能性を指摘した。しかし、当時

Start of Research Group for
Tunneling Reaction

Tetsuo MIYAZAKI

Research Group for Tunneling
Reaction

(1940年頃) トンネル反応を実証するデータがなく、彼はこの可能性を無視して議論を展開した。近年になり化学反応は起こり得ないと思われていた77K以下の低温でも反応が起こる例が日本、ロシア、アメリカ等の研究者によって見出された。筆者は4Kにおいて $\text{HD} + \text{D} \rightarrow \text{H} + \text{D}_2$ 反応の速度定数を初めて実測した。これは最も単純な反応系であり、信頼出来る反応のボテンシャルエネルギー曲面がわかっている唯一の例なので理論計算が可能となる。筆者等の実験が契機となり、佐藤・高柳やトルーラー（アメリカ）によりトンネル反応の厳密な理論計算が行われた。速度定数の実験値と理論値とは良い一致が見られ、トンネル反応は明解に実証された。トンネル反応の特色は触媒がなくても反応の活性化エネルギーが零になること、低温でも起こるため高選択性的な反応になること、さらに原子の波動性という普遍的現象に基づくことである。従って、今後この現象は多くの化学反応において重要なと思われる。

原子のトンネル効果による化学反応は、トンネル効果による原子の量子拡散や液体ヘリウム中の量子核生成等の物性物理学の最近のトピックスとも深く関連している。また、医学・生物学における放射線障害や老化現象は、フリーラジカル病とも呼ばれ、生体内的ラジカル反応が関与していると考えられている。生体内反応では水素原子の移行反応が重要である。水素原子は波動性が大きくトンネル効果が顕著に現われる所以、これらの生体内反応がトンネル反応である可能性は高い。このように原子トンネル反応は化学だけではなく物理学や生物学の先端課題とも関連している。