

第4回低温化学セミナー開催 「トンネル反応と理論」

原子トンネル反応研究グループ

高柳 敏幸

上記のセミナーを本研究グループの主催で、8月3、4日に行い、約30名ほどの参加があった。11件の講演の内、実験についてが4件、理論についてが7件であった。第1回目から3回目までの主題はそれぞれ、「トンネル反応と極低温技術」、「トンネル反応と生物学」、そして「トンネル反応と量子媒体」であり、これまでは特に実験的研究についての講演を中心として行ってきた。本セミナーの大きなテーマはもちろんトンネル効果であるが、実はトンネル効果を理解するためには理論的な考察が欠かせない。その最も顕著な例はガモフの原子核のアルファ崩壊理論で、既存の実験データが初めてトンネル効果によって起こっているという描像で理解できることが示された。したがって、今回「トンネル反応と理論」を主題として行われたことは、これまでの実験結果を理論的に見直すという意味において、非常に意義深いと考えられる。以下に講演内容について簡単に紹介するが、紙面の都合上発表者の氏名を省略させていただいた。

最初の4件は液体あるいは固体中の量子拡散について発表であった。その中でまず、量子媒体である液体固体パラ水素中での原子の拡散を理論的にシミュレーションする手法について発表があった。この方法では拡散そのものを実時間で追っていくことができ、実験では得られないダイナミックな情報が得られることが示された。今後の応用が期待される内容であった。続いての2件は、量子拡散の実験結果についての発表であった。次に、固体中での量子拡散についての理論的な解釈について詳しい解説があった。トンネル効果によるスペクトル分裂の問題と、コヒーレントあるいはインコヒーレント拡散とのつながりについて述べられ、今後の実験的研究を進めるにあたって、大変参考になるのではないかと感じた。

次の分子内トンネルリングでは分子内の回転運動や、構造変化がトンネル効果で起こることが実験結果と詳しい理論的解析から報告され、ポリシラン中の電

The Fourth Meeting on Tunneling Reaction and Low Temperature Chemistry — Tunneling Reaction and Theory —

Toshiyuki TAKAYANAGI

Research Group for Atomic Tunneling Reactions

子構造では分子中を電子が流れる現象について実験結果が報告された。次の1件は原子核反応におけるトンネル効果についての講演であり、原子分子との理論的な取扱いの違いについて述べられた。

次の2件では、トンネル効果の一般的な理論について発表された。最初の講演ではダイナミカルトンネリングという新しい形態のトンネル効果が分子の非常に高い振動励起状態で見出される可能性があることが指摘された。このダイナミカルトンネリングはエネルギー的には非常に高く、さらに多次的な効果があって初めて起こることが示され、量子力学の根本にも関わる大変興味深い現象である。講演では単純化されたモデルでの理論であったが、今後実際の系への応用も期待できる内容であった。また、次の講演では化学反応におけるトンネル効果が2つのポテンシャル間の非断熱遷移として、統一的に解釈できることが示された。これも、今後の実験結果等の解釈に非常に有効であると思われた。

最後の2件は当研究グループからの発表であった。最初の講演では、化学反応におけるトンネル効果を論ずる場合、ファンデルワールス相互作用が大変重要な役割をすることが理論的に指摘された。具体的な反応系での計算結果から、実験的に見出される現象についても解説された。次の講演では、最近実験的研究が行われた水素分子とメチルラジカルとの反応について、量子化学的な理論計算結果について発表された。水素分子が CD_3 とは反応するが、 CH_3 とは反応しないという奇妙な実験結果を受けての研究であるが、この現象が反応座標に沿った分子振動を考慮することによって定性的に説明が可能であることが報告された。

繰り返しになるが、今回の研究会の開催によってあらためて、アルファ崩壊の場合と同様、トンネル効果という現象が理論的な解釈があって初めて理解されることを感じた。