

量子的振動による化学結合 — 同位体置換による新しい分子結合の生成 —

概要

国立大学法人 埼玉大学(学長:山口宏樹)大学院理工学研究科 物質科学部門 高柳敏幸教授らの研究グループは、2 つの重い原子とそれらに挟まれた非常に軽い原子で構成される分子系(heavy-light-heavy system)として BrLBr(Lは水素原子の同位体)系に注目し高精度な量子化学計算を行いました。その結果、L が水素原子より軽いミュオニウムの場合では遷移状態構造が反応の入口・出口よりも安定になることが分かりました。これは 1980 年代に提唱された量子的振動による化学結合が存在する可能性、すなわち同位体置換がこれまでと全く異なる化学現象を生み出す可能性があることを示唆しています。本成果は 2014 年 12 月 8 日に刊行されるドイツの化学雑誌 *Angewandte Chemie* 誌に掲載される外、既に *Nature* 誌及び *Chemistry World*, *Phys. Org. Chemie. de*, *Popular Science*, *spectroscopyNOW* 等の Web ページに解説記事が掲載されています。

1 研究の背景

1980 年代に、2 つの重い原子とそれらに挟まれた非常に軽い原子で構成される分子系(heavy-light-heavy system)の遷移状態が、重い原子の間を軽い原子が行き来する量子的振動によって安定化することが提唱された。しかし、最近まで実験・理論の両面で量子的振動結合を示す有用な証拠は得られていない。

2 研究内容と成果

我々はハロゲン原子と水素原子の組み合わせに注目し、BrLBr(Lは水素原子の同位体)系について高精度な量子化学計算を行った。その結果、L が水素原子より軽いミュオニウムの場合では量子的な振動が激しくなることで遷移状態構造が Br + LBr 解離極限に比べて安定になることがわかった。これは、量子的振動による化学結合が存在する可能性、すなわち同位体置換がこれまでと全く異なる化学現象を生み出す可能性があることを示唆している。

3 今後の期待

量子的振動化学結合の水素結合分子系への展開

4 原論文情報

参考文献 D. G. Fleming, J. Manz, K. Sato, and T. Takayanagi, "Fundamental Change in the Nature of Chemical Bonding by Isotopic Substitution", *Angew. Chem. Int. Ed.* **53**, 13706–13709 (2014), doi: 10.1002/anie.201408211 (2014)

5 用語解説

同位体: 原子核の陽子数が等しく、中性子数が異なる原子のこと

ミュオニウム: 水素原子のプロトンの代わりに反ミュオン粒子を核とする水素原子の同位体のこと
質量は水素原子の約 1/9

同位体効果: 分子内の原子が同位体に置換されることによって、物理学的な性質や化学的な性質が変化すること

問い合わせ先

埼玉大学大学院理工学研究科物質科学部門

担当教員:高柳 敏幸

TEL 048-858-4961

e-mail tako@mail.saitama-u.ac.jp

〒338-8570 さいたま市桜区下大久保255 埼玉大学

本件発信元:総務部総務課広報担当(岡田・伊藤)

TEL :048-858-3932・3927 FAX:048-858-9057 e-mail:koho@gr.saitama-u.ac.jp