

補助事業番号 2019M-149

補助事業名 2019年度 光反応遷移状態計測のコンピュータ制御システム開発 補助事業

補助事業者名 神奈川大学 工学部 化学教室 反応機構解析研究室 橋本征奈

1 研究の概要

化学反応に伴う分子構造変化を可視化する“遷移状態分光”は、反応機構解析手法として非常に有用である。有機化学反応の遷移状態分光には、分子振動周期よりも閃光時間が十分に短い“5-fsパルス光”(閃光時間: 5×10^{-15} 秒)を用いる。しかし、物理的極限まで閃光時間が圧縮された5-fsパルス光は広帯域光であり、実験室の温度・湿度変化により閃光時間および強度が大きく変化する。現状の装置では装置調整や試料交換のために実験者が入退室することによりパルス光条件が乱れる。そこで、レーザー実験室の温度・湿度が安定化した後に、実験室外部から装置の調整が可能になれば、現状よりも高精度な計測が実現すると考察した。本研究では、遷移状態分光の高精度化を目的とし、コンピュータ制御による実験室外部からの装置調整と試料交換を実現する。

2 研究の目的と背景

本研究の目的は5-fsパルス光源の安定性向上による、測定精度の向上である。新材料開発、新反応開発において、光物性や反応機構の解明は重要である。これまでの研究において紫外5-fsパルス光を発生させ、これを用いる遷移状態分光装置を構築し、種々の化学反応遷移過程を可視化してきた。しかし、光反応量子効率(反応性)が低い試料は信号強度が低く測定が困難であった。測定装置の安定化によりS/N比が向上すれば測定可能な反応の範囲が広がると考え、本研究ではコンピュータ制御により実験室外部からの装置調整と試料交換の実現による、測定精度の向上を目指した。

3 研究内容

光反応遷移状態計測のコンピュータ制御システム開発

複数の試料を固定可能な試料ホルダーを作成し、1軸の電動ステージを2つ組み合わせて作成したステージに固定することで、パソコン制御により試料を交換可能なオートサンプラーを構築した(Sample)。さらに、測定前に調整を要するミラーマウント(図1 M1~M5)をパソコン制御が可能な電動ミラーマウントに置き換え、紫外5-fsパルス光のスペクトル形状(M1,2)、ポンプ・プローブ測定系への入射角(M3,4)、および試料表面での励起光の位置(M5)をパソコン操作により実験室外部から調整可能にした。

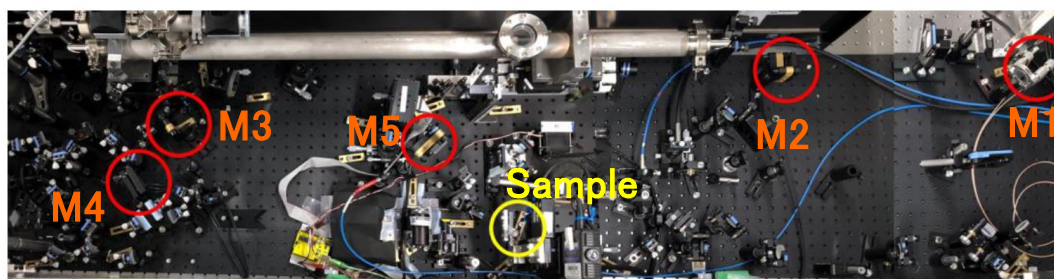


図1. 遷移状態分光装置の全体図

4 本研究が実社会にどう活かされるかー展望

化学反応に伴う分子構造変化を分子振動の実時間変化として可視化する遷移状態分光は、反応機構解析手法として非常に有用である。本研究で開発したより高精度な遷移状態分光装置により、多様な反応の遷移状態分光が可能になると期待される。

5 教歴・研究歴の流れにおける今回研究の位置づけ

これまで、遷移状態分光により種々の化学反応過程を計測し、反応に伴う分子構造変化を可視化してきた。しかし、反応性が低い試料は信号強度も低くなるため、計測することが困難であった。環境ノイズの低減を目指し、実験室の温度・湿度の安定化や、測定装置内での気流の抑制等、様々な対策をしてきたが、装置調整および試料交換に伴う実験者の入退室による環境変化を避けることは出来なかった。そのような状況下、本研究により実験室外部からの装置調整と試料交換が実現し、実験環境の長時間の安定性を確保できた。今後、従来不可能であった光反応性が低い試料の遷移状態分光により、新たな知見が得られると期待する。

6 本研究にかかわる知財・発表論文等

学会発表

1. 橋本征奈・藪下篤史・岡村幸太郎・岩倉いずみ、
“振動第一励起準位への選択励起と分子振動の実時間分光”
2019年光化学討論 (3A05)
2. 橋本征奈・藪下篤史・岡村幸太郎・岩倉いずみ、
“紫外 5-fs パルス光の安定化と振動実時間分光”
日本化学会 第100春季年会(2020) (2PC-044)