

# 化学反応遷移状態の可視化

**\* 化学結合の解離・生成過程を見たいと思いませんか？ \***

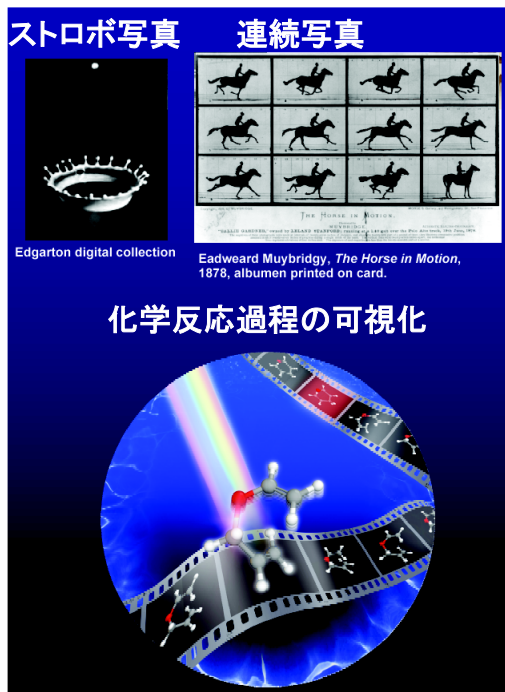
岩倉 いずみ・橋本 征奈(神奈川大学 化学生命学部 応用化学科 教授・助教)

## 研究目的・背景

日本が技術開発において世界をリードしてきたマテリアル産業分野では、分光測定を用いた不安定中間体の同定・理論計算による遷移状態の推定など、様々な手法を駆使した合理的な改良が検討されている。しかし、理論計算においてはその精度を見極められず、**実験による遷移状態の可視化が希求**されている。

## 技術の概要

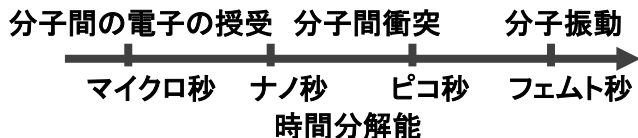
人の目で見ることのできない一瞬の動きは、ストロボ光を用いて連続写真として撮影することで可視化できる。同様に、分子内で原子が振動する周期よりも閃光時間が短いストロボ光(5-fs光)を用いて、化学反応に伴い結合が解離・生成する瞬間を“みる”。



## 化学反応における計測対象

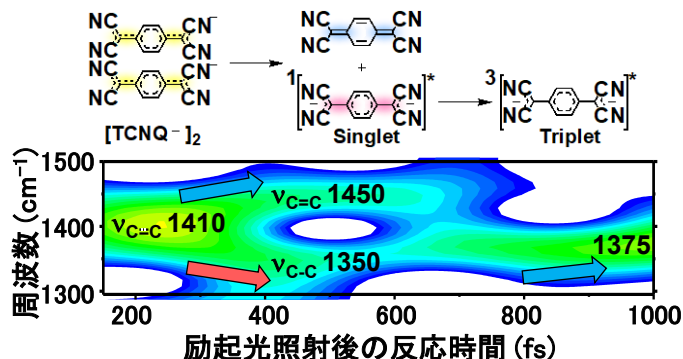
燐光      蛍光      並進・回転      振動

熱反応	分子間	温度ジャンプ法 PHジャンプ法 など	コヒーレント 分子振動 励起
	分子内		
光反応	分子間		会合体利用
	分子内		

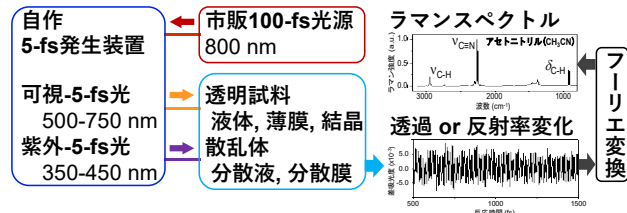


従来研究の計測領域      本研究の計測領域

## 例: 有機半導体(TCNQ)の2分子間電荷分離



## 測定システム例



## 想定される用途

- ◆ 可視化された遷移状態に基づく合理的な反応・マテリアル(医薬品・触媒・機能性材料など)設計
- ◆ 計算化学による反応機構のシミュレーションの確からしさの検証

## 従来技術より優れている点: 汎用性の拡張

- ◆ 熱反応・分子間反応への応用
- ◆ 粉末試料・分散溶液(反射型測定)への応用
- ◆ 装置の安定化による低濃度試料への応用

## 企業への期待

- 下記, 対応していただける企業を探しています。
- ◆ 本技術による解析のご要望
  - ◆ 本技術の製品化による普及